Kvantna hemija: struktura kursa 2025/26

Faza	Teme	Karakter bloka
I. Fundament (1–4. predavanje)	Prostor stanja, operatori, matrice, postulati, srednja vrednost i disperzija	**Kvantna mehanika – formalizam**
II. Primene (5–9. predavanje)	Šredingerova jednačina, ugaoni momenti, harmonijski oscilator, atom vodonika	**Kvantna mehanika – jednostavni sistemi**
III. Metode (10–14. predavanje)	Identične čestice i Paulijev princip, varijacioni i perturbacioni metod, simetrijske grupe	**Osnovne metode kvantne hemije**
IV. Teorijska kvantna hemija (15–20. predavanje)	Ab initio metode, Hartree–Fock, površine potencijalne energije, reakcione koordinate, osnove DFT	**Kvantna hemija višeelektronskih sistema (HF i post-HF metode)**

Cilj i ishodi učenja

Cilj kursa

Cilj kursa **Kvantna hemija** je da studenti steknu razumevanje fundamentalnih principa kvantne mehanike i načina njihove primene u opisu i predviđanju strukture i svojstava hemijskih sistema.

Ishodi učenja

Nakon uspešno završenog kursa student će moći da:

- objasni pojmove kvantnog stanja, operatora i postulata kvantne mehanike;
- primeni formalizam kvantne mehanike na jednostavne sisteme (harmonijski oscilator, atom vodonika, ugaoni moment);
- objasni princip antisimetrije i značenje Slaterove determinante u opisu višečestičnih sistema;
- koristi osnovne aproksimativne metode kvantne hemije (varijacioni i perturbacioni pristup);
- razume osnovne koncepte i ograničenja metoda tipa Hartree–Fock i DFT i poveže ih sa fizičko-hemijskim značenjem rezultata.

Ocena i način polaganja kursa

Elementi ocenjivanja

- **Tri nastavna kolokvijuma** – ukupno **45 poena** *(min. 5 poena po kolokvijumu)*
  provera razumevanja ključnih koncepata i primena.
- **Domaći zadaci – 5 poena** *(min. 2 poena)*
  kraći zadaci nakon predavanja.
- **Vežba na računaru (ORCA) – 10 poena** *(min. 3 poena)*
  praktična primena kvantno-hemijskih metoda.
- **Ispit – 40 poena** *(min. 21 poen)*
  usmeni deo nakon završetka nastave.

Ukupno: 100 poena

Ocena se formira sabiranjem svih aktivnosti tokom semestra. Prag za prolaz: 51 poen.

Napomena

Redovno praćenje nastave i prisustvo na vežbama predstavljaju osnovu za uspešno savladavanje gradiva i polaganje kursa.