

ФХКХ – Квантна хемија

Основне чињенице о предмету:

ЕСПБ: 7

Ниво: Основни курс на студијском програму Основне студије Факултета за физичку хемију

Наставни семестар: сваки јесењи семестар (VII)

Испити: Статутом Факултета предвиђени испитни рокови.

Језик: српски

Садржај предмета.

Математичке основе квантне механике (векторски простори, Ермитски и Хилбертови простори, ортонормиране базе, оператори, ермитски оператори, унитарни оператори, комутаторска алгебра, Диракова нотација, матрична репрезентација, решавање својствених проблема матрица, промена базе). Постулати квантне механике. Квантна механика и мерење. Теорија група и симетрије. Момент импулса. Идентичне честице и Паулијев принцип. Варијациони метод. Пертурбациони метод. Једноставни системи: хармонијски осцилатор и атом водоника. Атом хелијума и атом литијума. Периодни систем. Борн-Опенхајмерова апроксимација. Теорија молекулских орбитала. Хартри-Фоков модел. *Ab initio* модели: метода интеракције конфигурација, MCSCF, CC теорија и DFT метод.

Исход учења.

Предмет даје увод у квантну хемију. Са нагласком на теорију, служи као основа за студенте који ће се бавити теоријском хемијом и квантном хемијом, за оне који ће користити квантно-хемијске прорачуне у спрези са експерименталним радом, за студенте који ће се бавити спектроскопијом.

Студент је способан да разуме литературу из области теоријске хемије и квантне механике током свог будућег научног рада, да приступи квантно-хемијским прорачунима; зна да дефинише, објасни, дискутује о атомима, молекулима и уопште квантним системима.

Неопходна претходна знања.

ФХУСМ – Увод у структуру материје

ФХМ1 – Математика 1

ФХФ1 – Физика 1

ФХМ2 – Математика 2

ФХФ2 – Физика 2

ФХА – Атомистика

ФХФ3 – Физика 3

Курс квантне хемије наставља на курс Атомистике. Повезан је и са предметима Атомска спектросхемија и Молекулска спектросхемија, али више је основа тих предмета, па знање из тих предмета није нужно за савлађивање овог предмета.

Преклапање.

Квантна хемија према свом садржају се у неким сегментима преклапа са Атомистиком, Атомском спектроскопијом и Молекулском спектроскопијом.

Настава.

Предмет садржи 60 часова предавања и 60 часова рачунских вежби. То значи да студенти имају 120 часова (време које одговара 4 ЕСПБ) активне наставе, за време које се очекује да студенти активно савлађују предвиђено градиво.

Студент који је пријављен за предмет Квантна хемија обавезан је да похађа предавање и вежбе, према Статутом Факултета за физичку хемију (члан 53). Похађање предавања и завршетак вежби потврђују предметни наставник и сарадник својим потписима у индексу. Студент може да добије потпис ако је присуствовао 70% времена на настави (42 часа на вежбама и 42 на предавањима, укупно 84, тј. време које одговара 2,8 ЕСПБ).

Студент који је стекао право да добије потпис у индекс стиче од 10,5 до 15 поена од укупно 100 поена од којих зависи завршна оцена на предмету.

У току извођења наставе, студенти полажу предвиђене колоквијуме (члан 54 Статута). Три колоквијума, чији се датуми полагања унапред одређују, састоје се из решавања задатака. За решавање конкретних рачунских проблема потребно је знање које се стиче на предавањима и на вежбама.

Сваки колоквијум се бодује са 0 до 15 поена (појашњење: неће се сматрати да је студент успешно урадио тест ако освоји 51 поен на тесту, већ ће се сваки поен освојен на тесту урачунавати у укупне поене: од 0 до 15). То значи да након полагања сва три колоквијума студент осваја од 0 до 45 поена од укупно 100.

Студенти који нису могли изаћи на предвиђене термине колоквијума или су незадовољни својим резултатима, могу поново полагати исте (сваки студент од један до три колоквијума) у завршним недељама наставе јесењег семестра, што значи крајем јануара, у унапред предвиђеним терминима.

Предиспитним обавезама студент укупно стиче од 10,5 до 60 поена од укупних 100.

Информације о испиту.

Студент стиче право да полаже испит када изврши све предиспитне обавезе. Испити се одржавају у терминима и на начин предвиђен Статутом Факултета. То значи у јануарском, фебруарском, јунском, јулском, септембарском и октобарском испитном року.

Завршни испит се састоји из усменог испитивања. Усмено испитивање тестира способност студента да: репродукује градиво (оцена 6), разуме градиво (оцене 7 или 8), анализира, изводи закључке, упоређује, самостално размишља (оцене 9 или 10).

За усмено испитивање студент може, након извлачења цедуље са три питања, до 30 минута прелистати своје скрипте. У том случају, све што студент испише на папир као концепт неће се узимати у обзир приликом испитивања, већ ће само њему служити да се спреми за полагање. Алтернативно, студент може да не користи скрипте, тада ће се његов концепт који испише узети у обзир током полагања.

Завршни испит доноси максимално 40 поена. Поени су повезани са оценом на следећи начин: оцена шест (6) доноси 20.1 до 24 поена; оцена седам (7) доноси 24.1 до 28 поена; оцена осам (8) 28.1 до 32 поена; оцена девет (9) 32.1 до 36 поена и оцена десет (10) доноси 36.1 до 40 поена.

Жалбе.

Студент може уложити формалну жалбу на оцену добијену на испиту, ако има примедбе на процедуру током испита.

Могућност поправки.

Студенти који због болести или других разлога нису били у могућности да присуствују колоквијумима који се изводе у унапред предвиђеним терминима током јесењег семестра, као ни поправним терминима крајем јесењег семестра, могу предметном наставнику поднети захтев за полагање *наставног колоквијума*.

Такође, студенти који су незадовољни поенима које су освојили на три колоквијума (од 0 до 45), могу приступити полагању *наставног колоквијума* након што поднесу захтев наставнику.

У наставном колоквијуму, који се састоји из задатака, садржано је градиво сва три колоквијума. Колоквијум траје 4 часа. На наставном колоквијуму стиче се од 0 до 45 поена.

Наставни колоквијуми се одржавају оквирно једну или две недеље пре термина испита, што значи да ће се моћи организовати онолико пута колико има испитних рокова. Студенти (групно или индивидуално) треба да поднесу захтев пре испитног рока, а најкасније 2 недеље пре заказаног термина испита.

Термин наставног колоквијума се унапред одређује (студенти се обавештавају на огласној табли Факултета и на сајту Факултета).

Студенти који су незадовољни оценом на завршном испиту, могу регуларно поништити испит и поново изаћи на исти у неком од наредних рокова.

Контакт информације.

Наставник: др Миљенко Перић, редовни професор, члан САНУ
E-mail: peric@ffh.bg.ac.rs
Тел. +381 (0)11 3336-632

Наставник: др Станка Јеросимић, доцент
E-mail: stanka@ffh.bg.ac.rs
Тел. +381 (0)11 3336-799

Сарадник: др Радомир Ранковић, асистент
E-mail: rale@ffh.bg.ac.rs
Тел. +381 (0)11 3336-799

Сарадник: др Михајло Етински, асистент
E-mail: etinski@ffh.bg.ac.rs
Тел. +381 (0)11 3336-799

С. Јеросимић, октобар 2010. године.