
	УНИВЕРЗИТЕТУ У БАЊОЈ ЛУЦИ ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ		
	I циклус студија		
Студијски програм:	Хемија Наставни смјер / Општи смјер		

Назив предмета	Квантна хемија			
Шифра предмета	Статус предмета	Семестар	Фонд часова	Број ECTS бодова
СПХОНИ166КХ	изборни	V	3+0	4
Наставници	Доц. др Данијела Барић			
Условљеност другим предметима:			Облик условљености	
Циљеви изучавања предмета:				
Кроз овај курс ће студенти бити припремљени да са пуним разумевањем прате друге курсеве код којих се користе појмови хемијске структуре, атомске и молекулске орбитале, хибридне орбитале, канонске структуре, енергија резонанце, расподеле електронске густине и реактивности молекула.				
Исходи учења (стечена знања):				
У оквиру најједноставнијих квантно-механичких модела студенти ће бити у стању да сами израчунају молекулске орбитале једноставнијих молекула. Биће упознати са могућностима и ограничењима квантно-хемијских метода које са данас најшире користе.				
Садржај предмета:				
Основи таласне механике. Атомске орбитале. Молекулске орбитале. Симетрија молекула и орбитала. Операције симетрије. Директни производи. Вишеатомни молекули. Модел независног електрона. Таласне функције полимера и кристала. Теорија лигандног поља. Теорија валентне везе. Међумолекулске интеракције. Савршеније квантно-механичке методе (CI, DFT,..) и њихова примјена у хемији.				
Методe наставе и савладавање градива:				
Предавања, теоријске вежбе, семинари, презентације				
Литература:				
Иван Јуранић: Хемијска веза, Хемијски факултет, Београд, 1998. Драго Грданић: Молекуле и кристали, Школска књига, Загреб, 2000. Ира Н. Левине: Quantum Chemistry.				
Облици провјере знања и оцјењивања:				
Колоквијуми. Писмени испит, Семинарски рад, Презентација				
Колоквијум 1 и 2	20	Активност на настави	10	
Семинарски рад и презентација	10	Завршни испит	60	
Посебна назнака за предмет:				
Име и презиме наставника који је припремио податке: Доц. др Данијела Барић				