



| | | | |
|---|------------------------------|------------------------------|--------------|
| Студијски програм/студијски програми: Интегрисане академске студије фармације | | | |
| Назив предмета: Квантна хемија | | | |
| Наставник: Михаљ М. Поша, Зита Ј. Фаркаш-Агатић, Коста Ј. Поповић | | | |
| Статус предмета: изборни | | | |
| Број ЕСПБ: 3 | | | |
| Услов: Органска хемија 1; Органска хемија 2 | | | |
| Циљ предмета Упознавање студената са теоријама квантне хемије које се користе за израчунавање густине расподеле електрона у молекулима, као и параметре које произлазе из расподеле електрона са циљем да се користе као молекулски дескриптори. | | | |
| Исход предмета Упознавање са квантном природом расподеле електрона у вишенуклеарним системима. Студенти ће моћи самостално помоћу одговарајућих софтвера да израчунају дескрипторе молекула који произлазе од расподеле електрона | | | |
| Садржај предмета <i>Теоријска настава</i> 1. Таласна функција 2. Борн Опенхајмерова апроксимација 3. Теорија валенте везе 4. Теорија молекулских орбитала 5. Валшов дијаграм 6. Хикелова метода 7. Полу емпиријске методе 8. Аб иницио методе 9. Примене: Солватациона енергија, асоцијација жучних киселина <i>Практична настава</i> Коришћење одговарајућих софтвера | | | |
| Литература <i>Обавезна</i> 1. Grant GH, Richards WG. Computational Chemistry. Oxford University Press 1955 | | | |
| Број часова активне наставе | Теоријска настава: 30 | Практична настава: 15 | |
| Методе извођења наставе Предавања, вежбе | | | |
| Оцена знања (максимални број поена 100) | | | |
| Предиспитне обавезе | поена | Завршни испит | поена |
| активност у току предавања | | писмени испит | |
| практична настава | | усмени испит | 40 |
| колоквијум-и | | | |
| семинар-и | 60 | | |