



1. PREDMET: NASLOV PREDMETA

Šifra: 30-0175

Število kreditnih točk (ECTS): 6,5

Obseg ur: 60, predavanja 30, seminarji 30

Program: univerzitetni študijski program Biokemija

2. VZGOJNOIZOBRAŽEVALNI CILJI

Pri predmetu naj bi slušatelji poglobili razumevanje o strukturi in lastnosti snovi. Predmet jih seznanja s koncepti kvantne mehanike ob uporabi najnujnejšega matematičnega formalizma, z osnovami metod kvantne kemije in uporabo teh metod za razlago bistva kemijske vezi ter z obravnavo kemijske vezi in reaktivnosti. Daje kvantne osnove eksperimentalnih metod in smisel za logično mišljenje. Znanje, pridobljeno na predavanjih, utrjuje ob obravnavi konkretnih modelnih in realnih primerov. Poudarek je na računanju, pri čemer se utrjuje tudi znanje matematike in fizike, ki ga je študent pridobil v nižjih letnikih.

3. VSEBINA

Uvod v kvantno mehaniko: Kvantni pojavi. Modeli atoma. Heisenbergov princip nedoločljivosti. Schrödingerjeva enačba, valovne funkcije. Kvantnomehanski operatorji.

Modelni sistemi: Gibanje kvantnega delca ob preprostejših pregradah in v potencialnih jamah. Rotatorji in oscilatorji. Prehodi med kvantnimi stanji.

Metode približnega računanja: Variacijska metoda. Teorija motenj.

Atomi: Vodikov in helijev atom. Vrtilna količina in magnetni moment elektrona. Atomi v magnetnem polju. Paulijev princip. Hartree - Fockova metoda za atome. Hundova pravila. Elektronska konfiguracija atomov, periodni sistem.

Metoda molekularnih orbital (MO) in metoda valenčnih vezi (VB): Metoda molekularnih orbital (LCAO približek). Metoda valenčnih vezi. Povezava med obema metodama.

Dvo- in večatomne molekule: Molekulske orbitale. Princip maksimalnega prekrivanja. elektronegativnost. Ionski karakter vezi. Večatomne molekule (Hartree - Fockove in Roothaanove enačbe, zgradba računalniških programov). Semiempirične metode. Strukturni indeksi in reaktivnost molekul. Fulereni.

Kvantnomehanske osnove spektroskopije: Molekulski spektri. Izbirna pravila. Boltzmannova porazdelitev za nedegenerirane in degenerirane nivoje. Born - Oppenheimerjev približek. Širina spektralnih črt. Čisti rotacijski spektri (Starkov efekt). Vibracijski spektri. IR spektrometer. Vibracijsko - rotacijski spektri. Elektronski spektri. Ramanski spektri. Neradiacijski procesi deaktivacije. Fotoelektronska spektroskopija. Jedrska magnetna resonanca (osnove in eksperiment, kemijski premik, spin - spin konstanta sklopitve, NMR v tekočinah in trdnih snoveh). Elektronska spinska resonanca (osnove in eksperiment, faktor g, hiperfina sklopitve).

4. POVEZANOST Z DRUGIMI PREDMETI

Potrebno je osnovno znanje matematike (linearna algebra, diferencialni in integralni račun), fizike (mehanika, elektrika in magnetizem) ter računalništva.

5. ŠTUDIJSKA LITERATURA

OSNOVNI UČBENIKI:

- Koller, J. *Struktura atomov in molekul – osnove kvantne mehanike, atomi*, Ljubljana: FKKT, 2002.
- Koller, J. *Struktura atomov in molekul – molekule, osnove spektroskopije*, Ljubljana: FKKT, 2000.

DODATNA LITERATURA:

- Koller, J. *Struktura atomov in molekul – zbirka nalog z rešitvami* Ljubljana: FKKT, 1998.
- Pilar, F. L. *Elementary Quantum Chemistry* McGraw-Hill, 1992.
- Karplus, M. in Porter, R. N. *Atoms and Molecules* New York: Benjamin, 1970.
- Atkins, P. W. *Physical Chemistry* (peta izdaja), Oxford: Oxford University Press, 1994.

6. OBVEZNOSTI ŠTUDENTA

Pisni in ustni izpit.

PRIPRAVIL: Jože Koller

DATUM: 18. 7. 2003