

UČNI NAČRT PREDMETA / COURSE SYLLABUS

Predmet:	STRUKTURA ATOMOV IN MOLEKUL
Course Title:	STRUCTURE OF ATOMS AND MOLECULES

Študijski program in stopnja Study Programme and Level	Študijska smer Study Field	Letnik Academic Year	Semester Semester
UŠP Kemija, 1. stopnja	/	2.	3.
USP Chemistry, 1 st Cycle	/	2 nd	3 rd

Vrsta predmeta / Course Type:

obvezni / Mandatory

Univerzitetna koda predmeta / University Course Code:

KE119

Predavanja Lectures	Seminar Seminar	Vaje Tutorial	Klinične vaje Work	Druge oblike študija	Samost. delo Individual Work	ECTS
45	30	/	/	/	75	5

Nosilec predmeta / Lecturer:

prof. dr. Tomaž Urbič / Dr. Tomaž Urbič, Associate Professor

Jeziki / Languages:

Predavanja / Lectures: slovenski / Slovenian

Vaje / Tutorial: /

Pogoji za vključitev v delo oz. za opravljanje študijskih obveznosti:

Študent oz. kandidat mora imeti predmet opredeljen kot študijsko obveznost.

Prerequisites:

The course has to be assigned to the student.

Vsebina:

Uvod v kvantno mehaniko. Moderni modeli atoma. Kvantni pojavi. Dvojnost narave. Heisenbergov princip nedoločljivosti. Povezava med klasičnim in kvantnim opisom narave (Bohrov princip korespondence). Pojem diferencialne enačbe in nekateri enostavni primeri, valovna enačba za struno. Opisna razlaga Schrödingerjeve enačbe in zveza med njenimi rešitvami ter verjetnostjo. Uvedba pojma operatorja.

Modelni sistemi. Kvantni delec v potencialni jami. Tunelski efekt. Enostavni rotatorji in oscilatorji. Prehodi med kvantnimi stanji. Opisno o metodah približnega računanja.

Atomi. Vodikov in vodiku podoben atom (poudarek na opisu in predstavitvi lastnih

Content (Syllabus outline):

Introduction to quantum mechanics (models of atom, quantum phenomena, Heisenberg principle, wave – particle duality, Schrödinger equation, quantum operators, commutation, expectation values). Model systems (free particle, particle in a box, tunneling effect, rotators, oscillators, transition moments). Approximate calculations (variation methods, perturbation theory). Atoms (hydrogen and helium atom, orbital and spin angular momentum, atoms in magnetic fields, Pauli principle, Hartree-Fock model, electronic configuration, periodic systems). Molecular orbital method, valence bond theory. Molecules (molecular orbitals, maximum overlap principle, hybrid orbitals, Roothaan equations, self

funkcij, energije kot lastne vrednosti, kvantna števila), primerjava z rezultati Bohrovega modela. Orbitalna in spinska vrtilna količina. Paulijev princip in Paulijeve sile. Nameščanje elektronov na energijske nivoje, Hundova pravila. Ionizacijski potenciali, elektronske afinitete, efektivni radiji. Elektronska konfiguracija atomov in periodni sistem.

Metoda valenčnih vezi (VB) in metoda molekulskih orbital (MO). Metoda valenčnih vezi, sistem H₂ z metodo valenčnih vezi. Metoda molekulskih orbital, obravnavanje sistemov H₂⁺ in H₂. Povezava med obema pristopoma.

Dvo- in večatomne molekule. Slike in označevanje molekulskih orbital. Neto valenčnost. Hibridne orbitale (vpeljava in grafična predstavitev). Princip maksimalnega prekrivanja. Dipolni momenti hibridnih orbital. Dipolni momenti molekulskih orbital. Elektronegativnost (definicija, lestvice). Ionski karakter vezi. Večatomne molekule: elektronski problem (poenostavljen opis nastavitve problema in načinov reševanja, zgradba računalniških programov in praktični prikaz reševanja konkretnega primera s pomočjo računalnika). Hückelova metoda (Hückelova separacija, aromatičnost in pravilo 4n+2, alternirajoči in nealternirajoči ogljikovodiki). Strukturni indeksi in reaktivnost molekul.

consistent field method, Hückel method).

Temeljna literatura in viri / Readings:

- J. Koller, Struktura atomov in molekul – osnove kvantne mehanike, atomi, FKKT, Ljubljana 2002, 117 str., (100 %)
- J. Koller, Struktura atomov in molekul – molekule, osnove spektroskopije, FKKT, Ljubljana 2000, 114 str., (53 %)
- P.W. Atkins, Physical Chemistry (šesta izdaja), Oxford University Press, Oxford 1998, 998 str., (15%)

Dopolnilna literatura:

- F.L. Pilar, Elementary Quantum Chemistry, McGraw-Hill, 1990, 599 str.
- J. Koller, Struktura atomov in molekul – zbirka nalog z rešitvami, FKKT, Ljubljana 2002, 121 str.
- M. Karplus in R.N. Porter, Atoms and Molecules, Benjamin, New York 1970, 620 str.

Cilji in kompetence:

Predmet je del področja kvantna kemija, ki je uporaba metod kvantne fizike v kemiji.

Cilj predmeta je, da se študent seznaní z osnovnimi principi kvantne mehanike in uporabo le-teh ter novim načinom gledanja na svet mikrokozmosa.

Specifične **kompetence**: sposobnost razlage struktur atomov in enostavnih molekul, usmerjanje k samostojnemu teoretičnemu delu.

Objectives and Competences:

Course is part of the quantum chemistry field, which is usage of quantum mechanics methods in chemistry.

Learning outcomes: Understanding of the basic principles of quantum mechanics and the use of these principles in learning the new perspective of looking on the micro cosmos.

Competences: Ability to interpret the atomic structure and the structure of simple molecules. Directing of student to the independent theoretical work.

Predvideni študijski rezultati:

Znanje in razumevanje

Študent se pri predmetu nauči osnov kvantne mehanike, navadi se na abstraktno razmišljanje (marsikateri pojav nima klasične razlage), spozna teoretično ozadje mnogih kemijskih principov, nauči se vrednotiti rezultate teoretičnih računov. Spozna povezavo med klasično in kvantno fiziko.

Uporaba

Poznavanje principov, ki jih posreduje ta predmet, je nujna osnova za vse teoretične študije v kemiji in biokemiji. Študent se spozna z enačbami, s katerimi lahko obravnava atome, molekule in molekulske sisteme, rezultati katerih pa so velikosti fizikalno-kemijskih količin, ki jih lahko primerja z izmerjenimi.

Refleksija

Študent si pridobi občutek, da se obnašanja zelo majhnih (kvantnih) delcev ne da vedno predstavljati s pojmi iz vsakodnevne življenja in se navadi abstraktnega gledanja.

Prenosljive spretnosti

Pri predmetu se študenti naučijo prepoznavati problem, ga rešiti s pomočjo katerega od komercialnih računalniških programov in na koncu interpretirati rezultate. Poseben poudarek je na kritičnem ovrednotenju dobljenih rezultatov. Naučijo se uporabe domače in tuje literature ter podajanja zaključenega dela v pisni obliki.

Intended Learning Outcomes:

Knowledge and Comprehension

Student will learn about basics of quantum mechanics and abstract thinking that goes with it. He will learn about theoretical aspects of many chemical principles, to evaluate results of theoretical calculations.

Application

Knowledge of principles in the course is needed for all theoretical studies in chemistry and biochemistry. Students will be introduced to equations which are used to describe properties of atoms, molecules and molecular systems and give results of physical quantities which can be compared to experimental ones.

Analysis

Student will find out that behaviour of small quantum particles can not be explained from facts from everyday live, but from abstract thinking.

Skill-transference Ability

Students will learn how to identify problem, how to solve it from commercial computer programs and critically interpret the results. He will also get acquainted about the field's literature and present results in written form.

Metode poučevanja in učenja:

Predavanja
Seminar (računske naloge iz predelane snovi)

Learning and Teaching Methods:

Lectures, seminars.

Načini ocenjevanja:

Delež (v %) /

Weight (in %)

Assessment:

Pisni in ustni izpit.
Ocene: 6-10 pozitivno.
Študent piše dve pisni vaji (računske naloge), dosežena polovica možnih točk mu omogoči oprostitev pisnega izpita. V nasprotnem primeru opravlja pisni izpit iz računskih nalog in ustni izpit.

Written and oral exam.
6-10 pozitivne, 1-5 negativne

Reference nosilca / Lecturer's References:

- HUŠ, Matej, **URBIČ, Tomaž**. Quantum chemical tests of water-water potential for interaction site water models. *Acta chimica slovenica*, 2012, vol. 59, no. 3, str. 541-547.
- HUŠ, Matej, **URBIČ, Tomaž**. Strength of hydrogen bonds of water depends on local environment. *The Journal of chemical physics*, 2012, vol. 136, no. 14, art. no. 144305.
- URBIČ, Tjaša, **URBIČ, Tomaž**, AVBELJ, Franc, DILL, Ken A. Molecular simulations find stable structures in fragments of protein G. *Acta chimica slovenica*, 2008, vol. 55, no. 2, str. 385-395.