



Opće informacije		
Nositelj predmeta	Izv. prof. dr. sc. Zoran Kaliman	
Naziv predmeta	Kvantna teorija atoma i molekula	
Studijski program	Diplomski studij Fizika	
Status predmeta	izborni	
Godina	1.	
Bodovna vrijednost i način izvođenja nastave	ECTS koeficijent opterećenja studenata	6
	Broj sati (P+V+S)	30+15+15

1. OPIS PREDMETA

1.1. Ciljevi predmeta

Cilj ovog predmeta je objasniti najvažnije moderne metode kvantne teorije atoma i molekula koje se koriste u razumijevanju njihove elektronske strukture. Poseban naglasak bit će dan na računalnu stranu problema.

1.2. Uvjeti za upis predmeta

Nema formalnih preduvjeta za upis ovog predmeta, ali se pretpostavlja poznavanje svih općih i teorijskih fizika te matematičkih metoda fizike.

1.3. Očekivani ishodi učenja za predmet

Atomska fizika:

- Opisati i usporediti modele atoma kroz povijest.
- Izvesti i riješiti Schroedingerovu jednadžbu za vodik u sličan atom.
- Izvesti Diracovu jednadžbu u sfernom potencijalu. Izvesti popravke Schroedingerove jednadžbe iz Diracove jednadžbe. Diskutirati finu i hiperfinu strukturu energijskih nivoa atoma.
- Opisati modele helijeva atoma. Izračunati energije i druge veličine za helij u različitim aproksimacijama.
- Opisati modele višelektronskih atoma.
- Izvesti formulu za udarni presjek i vjerojatnost prijelaza, povezati s izbornim pravilima za zračenje atoma. Razumijeti i diskutirati izvod udarnog presjeka za fotoefekt.

Molekulska fizika:

- Usvojiti formalizam i notaciju kvantne mehanike.
- Koristiti varijacijski račun. Izvesti jednadžbe i koristiti linearni varijacijski račun. Izvesti i objasniti atomske jedinice.
- Izvesti i objasniti Born-Oppenheimerovu aproksimaciju.
- Objasniti spinske i prostorne orbitale u molekuli. Definirati i objasniti minimalnu bazu H_2 .
- Izvesti Hartreejevu i Hartree-Fockovu jednadžbu. Koristiti program za izračunavanje elektronske konfiguracije atoma. Interpretirati rješenja.

1.4. Sadržaj predmeta

Atomska fizika: Koncept atoma. vodik u slični atomi. Diracova jednadžba. Diracova jednadžba u sfernim koordinatama. Relativističke korekcije. Helijev atom. Teorijski modeli za višelektronske atome. Hartree-Fockov model. Udarni presjek i vjerojatnost prijelaza. Fotoefekt. Izborna pravila.

Molekulska fizika: Matematički uvod za kvantnu teoriju molekula. Valne funkcije za višelektronske sisteme. Orbitale, Slaterove determinante, funkcije baze. Minimalna baza H_2 . Notacija. Opća pravila za prostorne orbitale. Coulombovi integrali i integrali izmjene. Druga kvantizacija. Konfiguracije prilagođene spinu. Hartree-Fock model, kanonske jednadžbe, interpretacija rješenja HF jednadžbi. Roothaanove jednadžbe

1.5. Vrste izvođenja nastave

- ☒ predavanja
- ☒ seminari i radionice
- ☒ vježbe
- ☐ obrazovanje na daljinu
- ☐ terenska nastava

- ☒ samostalni zadaci
- ☒ multimedija i mreža
- ☐ laboratorij
- ☐ mentorski rad
- ☐ ostalo _____

W- www.unin.hr • E- ured@unin.hr

1.6. Komentari							
1.7. Obveze studenata							
Student je dužan prisustvovati nastavi i održati seminar u skladu s Pravilnikom o studiju.							
1.8. Praćenje ¹ rada studenata							
Pohađanje nastave	2	Aktivnost u nastavi	0.25	Seminarski rad	1	Eksperimentalni rad	
Pismeni ispit		Usmeni ispit	2.5	Esej		Istraživanje	
Projekt		Kontinuirana provjera znanja	0.25	Referat		Praktični rad	
Portfolio							
1.9. Ocjenjivanje i vrednovanje rada studenata tijekom nastave i na završnom ispitu							
Rad studenta na predmetu će se vrednovati i ocjenjivati tijekom nastave i na završnom ispitu. Ukupan broj postotaka koje student može ostvariti tijekom nastave je 70, dok na završnom ispitu (usmenom) može ostvariti 30% od ukupnog broja ocjenskih bodova. Detaljna razrada načina praćenja i ocjenjivanja rada studenata bit će prikazana u izvedbenom planu predmeta.							
1.10. Obvezna literatura (u trenutku prijave prijedloga studijskog programa)							
1. B. H. Brandsen and C. J. Joachain, <i>Physics of atoms and molecules</i> , 2nd edition. Prentice Hall, England, 2003.							
2. W. Demtroeder, <i>Atoms, Molecules and Photons</i> , An Introduction to Atomic-, Molecular-and Quantum-Physics, 2nd edition. Springer, Berlin Heidelberg, 2010.							
3. A.Szabo and N.S.Ostlund, <i>Modern Quantum Chemistry</i> , Sec.Ed. McGraw-Hill, New York, 1989.							
1.11. Dopunska literatura (u trenutku prijave prijedloga studijskog programa)							
1. Hans A. Bethe and Roman Jackiw, <i>Intermediate Quantum Mechanics</i> 3rd edition, Westview press, USA, 1997.							
2. Yung-Kuo Lim, <i>Problems and Solutions on Atomic, Nuclear and Particle Physics</i> World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2000.							
3. I. Akhiezer and V. B. Berestetskii, <i>Quantum electrodynamics</i> , 2nd edition, Interscience publishers 1965.							
4. Robert Eisberg and Robert Resnick, <i>Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles</i> , 2nd edition, John Wiley & Sons, 1985.							
5. H. Fridrich, <i>Theoretical Atomic Physics</i> , 3rd edition, volume 1,2. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg NY, 2006.							
6. P. Grant, <i>Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules, Theory and Computation</i> . Springer, NY, 2007.							
7. T.Helgaker,P.Joergensen and J.Olsen, <i>Molecular Electronic Structure Theory</i> , Wiley,Chichester, 2000.							
8. Cristopher Cramer, <i>Essentials of Computational Chemistry – Theories and Models</i> ”, Wiley, Chichester, 2004.							
9. Z.B.Maksić, <i>Theoretical Models of Chemical Bonding</i> , Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, Vol. 1-3, 1990-1991.							
1.12. Broj primjeraka obvezne literature u odnosu na broj studenata koji trenutno pohađaju nastavu na predmetu							
Naslov				Broj primjeraka		Broj studenata	
A.Szabo and N.S.Ostlund, <i>Modern Quantum Chemistry</i> , Sec.Ed. McGraw-Hill, New York, 1989.				2		2-5	
Robert Eisberg and Robert Resnick, <i>Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles</i> , 2nd edition, John Wiley & Sons, 1985.				2		2-5	
1.13. Načini praćenja kvalitete koji osiguravaju stjecanje izlaznih znanja, vještina i kompetencija							
Kvaliteta će se pratiti kroz konzultacije, ankete te razgovore nakon polaganja ispita.							

¹ **VAŽNO:** Uz svaki od načina praćenja rada studenata unijeti odgovarajući udio u ECTS bodovima pojedinih aktivnosti tako da ukupni broj ECTS bodova odgovara bodovnoj vrijednosti predmeta. Prazna polja upotrijebiti za dodatne aktivnosti.