





### Cilji in kompetence:

Predmet je del področja kvantna kemija, ki je uporaba metod kvantne fizike v kemiji. Cilj predmeta je, da se študent seznani 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 vsakodnevnega 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:**

<p>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.</p>		<p>Written and oral exam. 6-10 pozitivne, 1-5 negativne</p>
---	--	---

**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.