

## **Ispitna pitanja iz predmeta**

### **Osnove molekuskog modelovanja**

1. Uvod u molekulske modelovanje
2. Površina potencijalne energije
3. Stacionarne tačke i prelazno stanje
4. Mehanizmi hemijskih reakcija
5. Podela teorijski metoda: molekulske mehaničke metode, kvantno mehaničke metode
6. Optimizacija geometrije (kriva potencijalne energije, višedimenzionalan površina potencijalne energije i Hesseova matrica)
7. Ravnotežna geometrija i njena potvrda
8. Optimizacija prelaznih stanja, reakcije bez prelaznih stanja i potvrda prelaznih stanja
9. Kvantna mehanika: hamiltonijan, aproksimacija Šredingerove jednačine, Born-Openhajmerova aproksimacija.
10. Ograničenja talasne funkcije, Sletjerova determinanta.
11. Hartree-Fockova aproksimacija, linearna kombinacija atomskih orbitala.
12. Rothmann-Hall jednačine, SCF procedura, metode otvorene ljuske
13. Semiempirijske metode
14. Koorelacije elektrona
15. Moller-Plessetovi modeli.
16. Teorija Funkcionala gustine-Kohn-Shamova procedura: funkcionali zamene/korelacije, lokalna aproksimacija gustine i spinske gustine.
17. Aproksimacija generalizovanog gradijenta, hibridni meta funkcionali
18. Bazisni setovi : Sletjerove orbitale, gausijanske orbitale, kontrahirane gausijanske funkcije, minimalan bazisni set, bazisni setovi podeljene valence.
19. Dvostruki zeta bazni set podeljene valence, trostruki zeta bazni set podeljene valence, polarizovani bazni setovi, difuzne funkcije i korelacione konzistentni bazni setovi
20. Grafički modeli: izopovršine, molekulske orbitale, gustina elektrona, spinska gustina, elektrostatički potencijal i lokalni jonizacioni potencijal

#### Preporučena literatura:

1. S. Marković, Z. Marković: Molekulske modeliranje, Centar za naučno-istraživački rad SANU i Univerziteta u Kragujevcu, 2012. ISBN 978-86-81037-32-4,.

#### Pomoćna literatura:

1. The Molecular Modeling Workbook for Organic Chemistry, W.J. Hehre, A.J. Shusterman, J.E. Nelson, Wavefunction, Inc., 1998. ISBN 1-890661-06-6
2. Essentials of Computational Chemistry-Theories and Models, 2nd Edition, Christopher J. Cramer, John Wiley & Sons, Ltd., 2004. ISBN 0-471-48552-7
3. Tutorial and User's Guide, USA: Spartan '10, Wavefunction, Inc., Irvine, CA, 2011. ISBN 978-1-890661-41-4