

Студијски програм: Основне академске студије Физика			
Назив предмета: Моделирање у физици и техници			
Наставници: др Стеван Армаковић, Подрашчанин Зорица			
Статус предмета: обавезни			
Број ЕСПБ: 6			
Услов: нема			
Циљ предмета			
Оспособљавање студената за употребу савремених компјутерских протокола за моделовање својстава молекулских и периодичних структура, за примену у зеленим изворима енергије, заштити животне средине и фармацеутској индустрији			
Исход предмета			
Након одслушаног и научног садржаја предмета студенти ће бити у могућности да самостално креирају и примене протокол за компјутерску анализу различитих својстава молекулских и периодичних структура, као и да изврше анализу добијених података			
Садржај предмета			
<i>Теоријска настава</i>			
Значај моделовања молекулских и периодичних структура у индустрији. Основни елементи моделовања молекула и периодичних структура: геометријска оптимизација, алгоритми оптимизације, вибрациона анализа, одређивање својстава, улазни и излазни фајлови. Преглед основних нивоа теорије и компјутерских алата. Квантно-механички нивои теорије. Полу-емпиријски нивои теорије. Молекулска механика, динамика и докинг. Моделовање одабраних својстава молекулских и периодичних структура. Примена моделовања молекулских и периодичних структура у развоју нових материјала, заштити животне средине, енергетској, биомедицинској и фармацеутској индустрији.			
<i>Практична настава</i>			
Генерисање и визуелизација молекулских и периодичних структура. Прорачуни и симулације на онлајн платформи atomistica.online. Моделовање одабраних структурних, реактивних и спектроскопских својстава молекула и периодичних структура. Моделовање адсорпције. Моделовање интеракције између лиганда и протеина. Моделовање носача лекова. Моделовање енергетских својстава. Моделовање утицаја растварача.			
Литература			
1. Molecular Modeling Basics – Jan Jensen (CRC Press, Taylor and Francis Group)			
2. Онлајн платформа за молекулско моделовање atomistica.online доступна на https://atomistica.online			
Број часова активне наставе	Теоријска настава: 3	Практична настава: 2	
Методе извођења наставе			
Предавања(3часанедељно,утокусеместра),вежбе(1часнедељно,утокусеместра) и ДОН (1 час недељно).			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
активност у току предавања	5	писмени испит	40
практична настава	20	усмени испит	20
колоквијум-и		
семинар-и	15		