

Студијски програми: Основне академске студије хемије (ОХ); Основне академске студије хемије - контрола квалитета и управљање животном средином (ОКК)				
Врста и ниво студија: Основне академске студије првог степена				
Назив предмета: Примена рачунара у хемији			Шифра: ИХ-101	
Наставник: Каталин Ф. Месарош Сечењи				
Статус предмета: Изборни				
Број ЕСПБ: 5				
Услов: нема				
Циљ предмета Циљ предмета је да обучи и оспособи студенте за самостално коришћење рачунара у току писања семинарских радова из хемије, цртања графика или обраде добијених експерименталних података.				
Исход предмета Студент ће стећи неопходно знање које ће му бити од велике користи приликом уноса и обраде података, писања завршног или дипломског рада и нарочито семинарских радова као саставних делова већине предмета које студенти слушају у току студија хемије.				
Садржај предмета <i>Теоријска настава</i> Програми за унос текста, MS Word for Windows, Math type, уношење текста са специјалним хемијским симболима и хемијске једначине. Обука студената за писање семинарских радова на рачунару. Програми за табеларне калкулације, MS Excel, рад са табелама, коришћење функција, решавање задатака помоћу табела. Цртање разних типова графика и функција које се најчешће користе у хемији. Програм Origin и обрада експерименталних података. Једноставнија израчунавања и фитовања. Програми за цртање молекула и структурних формула, ChemSketch, ChemDraw. Снимање нацртаних графика, убацивање слика и графика у текст. Приказивање тродимензионалних структура молекула и 3-D графици. Оптимизација структуре и геометрије молекула. Конформациона анализа малих молекула. Коришћење база података. <i>Практична настава</i> Вежбе су саставни део курса и обухватају практичну примену рачунара у сврху писања и обраде текста, графика и слика у хемији.				
Литература 1. Andrew R. Leach, Molecular Modeling principles and applications, Pearson Prentice Hall, UK, Second Edition, 2009.				
Број часова активне наставе:				Остали часови
Предавања 2	Вежбе:		Други облици наставе:	
	Аудиторне: 2	Лабораторијске:		Студијски истраживачки рад:
Методе извођења наставе: Предавања, експерименталне вежбе, консултације.				
Оцена знања (максимални број поена 100)				
Предиспитне обавезе	Поена	Завршни испит	Поена	
активност у току предавања	10	писмени испит	---	
практична настава	20	усмени испт	20	
семинари	---	практичан испит	50	