

Назив предмета: Хемијска структура и особине хемијских једињења	Шифра предмета:	ДСХ-701
Наставник: др Нада Перишић-Јањић, редовни професор, др Татјана Ђаковић-Секулић, редовни професор		
Статус предмета: Изборни		
Број ЕСПБ: 15		
Услов: нема		
Циљ предмета Упознавање студента са везом која постоји измеђи структуре и особина хемијских једињења.		
Исход предмета Примена различитих хеометријских метода у обради експерименталих података и извођење закључака из добијених корелација.		
Садржај предмета <i>Теоријска настава</i> Повезаност хемијске структуре, особина и физичко-хемијских параметара молекула. Дескриптори, атомски, фрагментарни и молекулски. Мероде за одређивање и израчунавање дескриптора. Веза између дескриптора и активности (QSPR - Quantitative Structure-Property Relationships). Примена MLR (Multiple Linear Regression), PCA (Principal Component Analysis), HCA (Hierarchical Cluster Analysis), PLS (Partial Least Square) и других хеометријских метода у обради експерименталих података и извођење закључака из добијених резултатат корелација.		
Препоручена литература 1. R. Kaliszan, QSRR: Quantitative Structure-(Chromatographic) Retention Relationships. Chem. Rev. 2007; 107: 3212–3246. 2. A. Nasal, D. Siluk, R.Kaliszan, Chromatographic Retention Parameters in Medicinal Chemistry and Molecular Pharmacology. Curr. Med. Chem. 2003; 10 381-426. 3. S. K. Poole, C. F. Poole, Separation methods for estimating octanol–water partition coefficients. J. Chromatogr. B 2003; 797:3–19. 4. Sz. Nyiredy (Editor), Planar chromatography, Springer Scientific Publisher, Budapest, 2001.		
Број часова активне наставе 10 (150)	Теоријска настава: 5 (75)	Студијски-истраживачки рад: 5 (75)
Методе извођења наставе Предавања, семинарски рад и консултације.		
Оцена знања (максимални број поена 100)		
Семинарски рад (40 поена), усмени испит (60 поена).		