Студијски програм: Мастер академске студије хемије	
Врста и ниво студија: Мастер академске студије	
Назив предмета: КОРЕЛАЦИОНА АНАЛИЗА У ХЕМИЈИ	**Шифра: ИХН-508**
Наставник (Име, средње слово, презиме)**:** Татјана Љ. Ђаковић-Секулић	
Статус предмета: Изборни	
Број ЕСПБ: 7	
Услов: нема	

Циљ предмета

Упознавање са новим, модерним приступима QSAR методологије у обради и анализи експерименталних података уз примену напредних рачунарских метода.

Исход предмета

Након успешно завршеног курса, студент је у стању да:

1. Анализира везу између структуре и особина молекула
2. Израчуна одговарајуће молекулске дескритпоре
3. Успостави вишепараметарску корелацију у циљу тумачења хемијске структуре и активности молекула
4. Анализира и обрађује експерименталне податаке

Садржај предмета

Теоријска настава

Концепт LFER (Linear Free Energy Relationships) - линеарног односа слободних енергија. Теоријски и практични аспекти LFER корелација. Теоријски модели који се користе у интерпретацији линеарних корелација. Хаметова једначина. Вишепараметарски облик Хаметове једначине. Молекулски дескриптори. Веза озмеђу хемијске структуре, молекулских дескриптора и активности молекула (QSAR - Quantitative Structure-Activity Relationshyps) – примена.

Практична настава:Вежбе, Други облици наставе, Студијски истраживачки рад

Рачунске вежбе из области корелације структуре и особина молекула. Примена статистичких метода у обради екперименталних података.

Литература

1. N.B. Chapman, J. Shorter, Correlation analzsis in chemistry, Plenum press, 1978.
2. Corwin H. Hansch, Albert Leo, Substituent Constants for Correlation Analysis in Chemistry and Biology, Wiley, 1979.
3. Matthias Otto: Chemometrics: Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry; Wiley-VCH; 1999.
4. James N. Miller, Jane C. Miller: Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry*;* Pearson Education; Harlow 2000.
5. Richard G. Brereton: Chemometrics: Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant; Wiley 2003.

Број часова активне наставе					Остали часови
Предавања: 2	Вежбе:		Други облици наставе: 2	Студијски истраживачки рад:	
	Рачунске	Лабораторијске 1			

Методе извођења наставе интерактивне методе у оквиру предавања и вежби , тимски рад студената у оквиру практичне наставе, индивидуалне и групне консултације.

Оцена знања (максимални број поена 100)

Предиспитне обавезе	**поена**	Завршни испит	**поена**
активност у току предавања	10	писмени испит	40
практична настава	50		