

Студијски програм : Основне академске студије хемије. Основне академске студије хемије - контрола квалитета и управљање животном средином, Интегрисане академске студије наставе хемије			
Назив предмета: ПРИМЕНА РАЧУНАРА У ХЕМИЈИ		Шифра:	ИХ-101
Наставник: Милан Б. Вранеш			
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, обраде и интерпретације добијених експерименталних података			
Исход предмета Студент ће стећи неопходно знање које ће му бити неопходно приликом уноса и обраде експерименталних резултата и интерпретације истих, као и током 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 Белешке са предавања <i>Помоћна литература</i> 1. Andrew R. Leach, Molecular Modeling principles and applications, Pearson Prentice Hall, UK, Second Edition, 2009			
Број часова активне наставе 4 (60)	Теоријска настава: 2 (30)	Практична настава: 2 (30)	
Методe извођења наставе Предавања, практична настава, консултације.			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
активност у току предавања	10	писмени испит	50
практична настава	20		
колоквијуми	20		