

Табела 5.2 Спецификација предмета

Студијски програм: Мастер академске студије хемије (МХ)			
Назив предмета: РАЧУНАРСКА ХЕМИЈА И МОЛЕКУЛСКО МОДЕЛОВАЊЕ		Шифра:	ИХА-513
Наставник: Борко М. Матијевић			
Статус предмета: изборни			
Број ЕСПБ: 6			
Услов: нема			
Циљ предмета Добијање неопходног знања и вештина за коришћење различитих израчунавања и моделовања као и неопходност њихове примене у хемији. Напредно решавања питања и проблема који се не могу решити експерименталним путем, већ само применом рачунара. Приближавање поступка планирања експерименталног рада у различитим областима хемије. Упознавање са значајем молекулског моделовања, изучавања геометрије и оптимизације молекула.			
Исход предмета Након успешно завршеног курса, студент ће бити оспособљен за коришћење рачунарских алата и метода за молекулско моделовање и решавање проблема који се могу једино решити коришћењем информатичког приступа. Стећи ће вештине планирања дизајна нових синтеза у различитим гранама хемије. Моћи ће боље да упозна оптримизују и геометрију молекула кроз израчунавања и добијене резултате користи у планирању експерименталног дела рада. Разумеће значај коришћења рачунарских метода у хемији и научити да их примењује у пракси.			
Садржај предмета <i>Теоријска настава</i> Појам рачунарске хемије и молекулског моделовања. Рачунарске методе у хемији и алати у хемиинформатици. Молекулска механика. Геометрија молекула, стереохемија и оптимизација. Конформациона анализа и молекулска динамика. Предвиђање понашања једињења на основу теоријских израчунавања. Молекулско моделовање и дизајн у синтезама, QSAR. <i>Практична настава</i> Упознавање са различитим програмским пакетима који се користе у хемиинформатици. Молекулска механика, алгоритми оптимизације, конформациона анализа и оптимизација геометрије молекула. Коришћење <i>Ab initio</i> и DFT метода за решавање проблема у хемији. 3D анализа, структура и моделовање протеина, дизајн лекова на основу структуре и фармаколошке примене, QSAR. Корићење база података.			
Литература С. Марковић, З. Марковић, <i>Молекулско моделирање</i> , Центар за научно-истраживачки рад САНУ и Универзитет у Крагујевцу, 2012. М. Златановић, Д. Петровић, <i>Основи молекулског моделовања, практикум</i> , Хемијски факултет, Универзитет у Београду, 2016. <i>Помоћна литература</i> А. R. Leach, <i>Molecular Modeling – principles and applications</i> , 2 nd ed., Pearson Education, 2001. H.-D-Höltje, W. Sippl, D. Rognan, G. Folkers, <i>Molecular Modeling-basic principles and applications</i> , 3 rd ed., Wiley-VCH, 2008.			
Број часова активне наставе 5 (75)	Теоријска настава: 2 (30)	Практична настава: 3 (45)	
Методе извођења наставе Предавања, теоријске вежбе, семинарски рад			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
активност у току предавања	5	писмени испит	20
практична настава	10	усмени испит	20
семинари	45		