

**Табела 5.2** Спецификација предмета

<b>Студијски програм:</b> Мастер академске студије хемије			
<b>Назив предмета:</b> КОРЕЛАЦИОНА АНАЛИЗА У ХЕМИЈИ		<b>Шифра:</b>	ИХН-508
<b>Наставник:</b> Татјана Љ. Ђаковић Секулић			
<b>Статус предмета:</b> изборни			
<b>Број ЕСПБ:</b> 5			
<b>Услов:</b> нема			
<b>Циљ предмета</b> Циљ предмета је да се студент упозна са концептима LFER и QSAR и примени их у обради и анализи експерименталних података.			
<b>Исход предмета</b> Након успешно завршеног курса, студент је у стању да: <ol style="list-style-type: none"> <li>1. дефинише односе (корелације) који постоје између структуре и особина молекула,</li> <li>2. разуме концепте LFER и QSAR корелација,</li> <li>3. самостално израчуна различите молекулске дескрипторе коришћењем различитих софтверских пакета,</li> <li>4. анализира вишепараметарске корелације које дефинишу однос молекулих дескриптора и особина молекула.</li> </ol>			
<b>Садржај предмета</b> <i>Теоријска настава</i> 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 између хемијске структуре, молекулских дескриптора и активности молекула (QSAR - Quantitative Structure-Activity Relationships) – примена. <i>Практична настава</i> Примена умножене линеарне регресије и тумечење израчунатих мултипараметарских зависности.			
<b>Литература</b> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. N.B. Chapman, J. Shorter, Correlation analysis in chemistry, Plenum press, 1978.</li> <li>2. Corwin H. Hansch, Albert Leo, Substituent Constants for Correlation Analysis in Chemistry and Biology, Wiley, 1979.</li> </ol> <i>Помоћна литература</i> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Matthias Otto: Chemometrics: Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry; Wiley-VCH; 1999.</li> <li>2. James N. Miller, Jane C. Miller: Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry; Pearson Education; Harlow 2000.</li> <li>3. Richard G. Brereton: Chemometrics: Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant; Wiley 2003.</li> </ol>			
<b>Број часова активне наставе</b> 4 (60)	<b>Теоријска настава:</b> 2 (30)	<b>Практична настава:</b> 2 (30)	
<b>Методe извођења наставе</b> Предавања, аудиторне вежбе, консултације.			
<b>Оцена знања (максимални број поена 100)</b>			
<b>Предиспитне обавезе</b>	поена	<b>Завршни испит</b>	поена
Семинарски рад	<b>70</b>	усмени испит	<b>30</b>