

Табела 5.2 Спецификација предмета

<b>Студијски програм</b> :Мастер академске студије хемије-модул Б:Органска хемија			
<b>Назив предмета: МОЛЕКУЛСКО МОДЕЛИРАЊЕ У ОРГАНСКОЈ ХЕМИЈИ</b>		<b>Шифра:</b>	ИХО-508
<b>Наставник:</b> Александар М. Окљеша			
<b>Статус предмета:</b> изборни			
<b>Број ЕСПБ:</b> 5			
<b>Услов:</b> -			
<b>Циљ предмета</b> Упознавање са могућностима примене рачунара и софтверских пакета у разумевању различитих проблема у оквиру органске хемије.			
<b>Исход предмета</b> Након успешног завршетка овог курса студент ће бити у стању да: Демонстрира стечено знање о могућностима примене рачунара и софтверских пакета као саставног делатеоријског приступа решавања проблема у оквиру органске хемије.			
<b>Садржај предмета</b> <i>Теоријска настава</i> Хартри-Фокова метода, Пост-Хартри-Фокове методе и теорија функционала густине (ДФТ). Површина потенцијалне енергије, оптимизација геометрије (равнотежне геометрије и прелазна стања). Вибрационе фреквенције и термохемијске величине. Теоријски приступ изучавању органске хемије. <i>Практична настава</i> Рад са одабраним софтверским пакетима.			
<b>Литература</b> 1. S. M. Bachrach, Computational Organic Chemistry <i>Second Edition</i> , John Wiley & Sons, Inc., New Jersey, 2014.			
<b>Број часова активне наставе</b> 4 (60)	<b>Теоријска настава:</b> 2 (30)	<b>Практична настава:</b> 2 (30)	
<b>Методе извођења наставе</b> Предавање, аудиторне вежбе, консултације.			
<b>Оцена знања (максимални број поена 100)</b>			
<b>Предиспитне обавезе</b>	поена	<b>Завршни испит</b>	поена
активност у току предавања	10	усмени испит	30
практична настава	30		
семинар	30		