

Назив предмета: ХЕМИЈСКА СТРУКТУРА И ОСОБИНЕ ХЕМИЈСКИХ ЈЕДИЊЕЊА		Шифра предмета:	ДСХ-701
Наставник др Татјана Љ. Ђаковић-Секулић, редовни професор			
Статус предмета: Изборни			
Број ЕСПБ: 15			
Услов: Нема			
Циљ предмета			
Основни циљ курса је да студенту пружи виши ниво знања на основу ког ће моћи успоставити квантитаивну везу између хемијске структуре и особина молекула.			
Исход предмета			
Након успешног завршетка овог курса студент је у стању да:			
<ol style="list-style-type: none"> 1. експерименталним и рачунским путем одреди молекулске декрипторе, 2. успостави корелациони однос између структуре и особина молекула применом различитих мултиваријационих метода и 3. изводи закључаке из добијених корелација. 			
Садржај предмета			
<i>Теоријска настава</i>			
Повезаност хемијске структуре, особина и физичко-хемијских параметара молекула. Дескриптори, атомски, фрагментарни и молекулски. Методе за одређивање и израчунавање дескриптора. Веза између дескриптора и активности (QSPR - Quantitative Structure Property Relationships). Примена MLR (Multiple Linear Regression), PCA (Principal Component Analysis), HCA (Hierarchical Cluster Analysis), PLS (Partial Least Square) и других хеометријских метода у обради експерименталних података и извођење закључака из добијених резултатат корелација.			
<i>Практична настава</i>			
Утврђивање квантитаивних односа између структуре која се описује различитим молекулским дескрипторима и експерименталних података. Примена метода мултиваријационе анализе у интерпретацији експерименталних резултата.			
Препоручена литература			
<ol style="list-style-type: none"> 1. Recent Advances in QSAR Studies, Methods and Applications, editori Tomasz Puzyn, Jerzy Leszczynski i Mark T.D. Cronin, Springer, 2010. 2. H. Kubini, QSAR: Hansch analysis and related approaches, VCH Verlagsgesellschaft mbH, D-69451 Weinheim 1993. 3. R. Kaliszan, Structure and Retention in Chromatography: a chemometric approach, Harwood Academic Publishers, 1997. 			
Број часова активне наставе 10 (75+75)	Теоријска настава: 5 (75)	Практична настава: 5 (75)	
Методе извођења наставе			
Предавања, израда и одбрана пројеката на одабрану тему из градива у склопу практичне наставе, студијски истраживачки рад и консултације			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Урађен и одбрањен пројекат на задату тему из градива	50 поена	Усмени испит	50 поена