

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |                              |                              |          |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------|------------------------------|----------|
| Назив предмета: РАЧУНСКА ОРГАНСКА ХЕМИЈА                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |                              | Шифра предмета:              | ДСХ-724  |
| Наставник: др Александар М. Окљеша, доцент                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |                              |                              |          |
| Статус предмета: Изборни                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |                              |                              |          |
| Број ЕСПБ: 15                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |                              |                              |          |
| Услов: Нема                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |                              |                              |          |
| Циљ предмета                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |                              |                              |          |
| Стицање знања о могућностима примене рачунара и софтверских пакета у разумевању различитих проблема у оквиру органске хемије. Оспособљавање за рад са одабраним софтверским пакетима.                                                                                                                                                                                   |                              |                              |          |
| Исход предмета                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |                              |                              |          |
| Након успешног положеног курса студент је у стању да:                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |                              |                              |          |
| Примени знање у циљу разумевања и решавања различитих проблема у оквиру органске хемије као што су реактивност и могућност предвиђања тока хемијске реакције.                                                                                                                                                                                                           |                              |                              |          |
| Садржај предмета                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |                              |                              |          |
| Теоријска настава                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |                              |                              |          |
| Апроксимација Шредингерове једначине (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 перцикличних и органских реакција у којима учествују анјони. |                              |                              |          |
| Практична настава                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |                              |                              |          |
| Самостални рад студента са одабраним софтверским пакетима и његова примена у изучавању проблема који су везани за истраживачки рад самог студента.                                                                                                                                                                                                                      |                              |                              |          |
| Препоручена литература                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                              |                              |          |
| 1. S. M. Bachrach, Computational Organic Chemistry <i>Second Edition</i> , John Wiley & Sons, Inc., New Jersey, 2014.                                                                                                                                                                                                                                                   |                              |                              |          |
| 2. C. J. Cramer, Essentials of Computatuional Chemistry Theories and Models <i>Second Edition</i> , John Wiley & Sons Ltd,Chichester, 2004.                                                                                                                                                                                                                             |                              |                              |          |
| 3. F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry <i>Second Edition</i> , John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2007.                                                                                                                                                                                                                                                  |                              |                              |          |
| Број часова активне наставе:<br>10 (75+75)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | Теоријска настава:<br>5 (75) | Практична настава:<br>5 (75) |          |
| Методе извођења настав                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                              |                              |          |
| Предавања, студијски истраживачки рад и консултације.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |                              |                              |          |
| Оцена знања (максимални број поена 100)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |                              |                              |          |
| Студијски истраживачки рад                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | 80 поена                     | Усмени испит                 | 20 поена |