

Табела 5.2. Спецификација предмета

Студијски програм: MAC Хемија			
Назив предмета: Корелациона анализа у хемији, MX111			
Наставник: Татјана Ђаковић Секулић, Ђенђи Ваштаг			
Статус предмета: изборни			
Број ЕСПБ: 5			
Услов: нема			
Циљ предмета			
Циљ предмета је да се студент упозна са концептима LFER и QSAR и примени их у обради и анализи експерименталних података.			
Исход предмета			
Након успешно завршеног курса, студент је у стању да:			
1. дефинише односе (корелације) који постоје између структуре и својства молекула,			
2. разуме концепте LFER и QSAR корелација,			
3. самостално израчуна различите молекулске дескрипторе коришћењем различитих софтверских пакета,			
4. анализира више параметарске корелације које дефинишу однос молекулих дескриптора и својстава молекула.			
Садржај предмета			
Теоријска настава			
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. Више параметарски облик Хаметове једначине. Молекулски дескриптори. Веза између хемијске структуре, молекулских дескриптора и активности молекула (QSAR-Quantitative Structure-Activity Relationships) – примена.			
Практична настава			
Примена умножене линеарне регресије и тумечење израчунатих мултипараметарских зависности.			
Литература			
1. 1. Т. Ђаковић Секулић: Материјал са предавања (доступан преко ePMF (Moodle) портала)			
Помоћна литература			
2. N. B. Chapman, J. Shorter, Correlation analzsis in chemistry, Plenumpress, 1978.			
3. C. H. Hansch, A. Leo, Substituent Constants for Correlation Analysis in Chemistry and Biology, Wiley, 1979.			
4. M. Otto, Chemometrics: Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry, Wiley-VCH, 1999.			
5. J. N. Miller, J. C. Miller, Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry, Pearson Education; Harlow, 2000.			
6. R. G. Brereton, Chemometrics: Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant, Wiley, 2003.			
Број часова активне наставе: 4	Теоријска настава: 2	Практична настава: 2	
Методe извођења наставе			
Предавања, аудиторне вежбе, консултације.			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
Семинарски рад	70	усмени испт	30