

Табела 5.2. Спецификација предмета

Студијски програм: МАС Хемија			
Назив предмета: Молекулско моделовање у органској хемији			Шифра: МХ212
Наставник: Александар Окљеша			
Статус предмета: изборни			
Број ЕСПБ: 5			
Услов: нема			
Циљ предмета Упознавање са могућностима примене рачунара и софтверских пакета у разумевању различитих проблема у оквиру органске хемије.			
Исход предмета Након успешног завршетка овог курса студент је у стању да: наведе и објасни могућности примене рачунара и софтверских пакета као саставног дела теоријског приступа решавања проблема у оквиру органске хемије; правилно управља софтверским пакетима за молекулско моделовање; примени одговарајући ниво теорије у циљу решавања постављених задатака који су у складу са садржајем предмета; анализира податке добијене од стране софтвера.			
Садржај предмета <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.			
Литература 1. 1. С. Марковић, 3. Марковић, Молекулско моделирање, Центар за научно-истраживачки рад Српске академије наука и уметности и Универзитета у Крагујевцу, Крагујевац, 2012. 2. А. Окљеша, презентације са предавања из предмета Молекулско моделовање у органској хемији доступне на сајту ПМФ-а преко еПМФ – система за подршку е-учењу Помоћна литература 3. S. M. Bachrach, Computational Organic Chemistry Second Edition, John Wiley & Sons, Inc., New Jersey, 2014.			
Број часова активне наставе: 4		Теоријска настава: 2	Практична настава: 2
Методе извођења наставе Предавање, аудиторне вежбе, консултације.			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
активност у току предавања	10	усмени испит	30
практична настава	30		
домаћи задаци	30		