

Назив предмета: Молекулско моделовање у органској хемији (ИБДХ4, Х-335)		
Наставник или наставници (презиме средње слово име): Благојевић Д. Полина		
Статус предмета: изборни		
Број ЕСПБ:8		
Услов:-		
Циљ предмета Упознавање студената са основама компјутерске хемије и могућностима које она пружа за проучавање органских једињења и реакција.		
Исход предмета Студенти ће бити оспособљени да самостално изаберу одговарајући теоријски модел за решавање конкретних проблема у органској хемији. Научиће да самостално изврше оптимизацију геомјетрије и претрагу конформационог простора одабраног органског једињења и симулирају његове NMR, IR и UV-VIS спектре. Такође, биће оспособљени да компјутерски предвиде одабране особине органских једињења, које ће им даље омогућити да предвиђају разлике у реактивности, тј. активности у оквиру одговарајућег сета једињења.		
Садржај предмета <i>Теоријска настава</i> Компјутерска хемија: могућности и ограничења. Софтвер. Примена у проучавању органских молекула. Различити нивои теорије (4 часа). Одабир одговарајућег теоријског модела за проучавање органских молекула и реакција: молекулска и квантна механика, Хартри-Фокова метода, базисни скупови, пост Хартри-Фокове методе, комбиноване методе (6 часова). Графички модели и мапе особина органских молекула: молекулске орбитале, густина електрона, спинска густина, електростатички потенцијал (4 часа). Моделовање вибрационих фреквенција и термохемијских особина органских молекула (6 часова). Оптимизација геометрије органских молекула: равнотежне геометрије (6 часа). Конформациони простор органских молекула (6 часова). Прелазна стања у органским реакцијама: проналажење и потврда (6 часова). Моделовање реакционих енергија (6 часова). Симулирање NMR, IR и UV-VIS спектра органских једињења коришћењем софтвера за молекулско моделовање (6 часова). Молекулски дескриптори (4 часа). QSAR (квантитативна веза између структуре и активности) анализа органских једињења (6 часова).		
Препоручена литература 1. С. Марковић, З. Марковић, <i>Молекулско моделирање</i> , Центар за научно-истраживачки рад Српске академије наука и уметности и Универзитет у Крагујевцу, Крагујевац, 2012. 2. F. Jensen, <i>Introduction to computational chemistry</i> , Second Edition, John Wiley & Sons, Ltd., 2007. 3. N.L. Allinger, <i>Molecular structure: Understanding steric and electronic effects from molecular mechanics</i> , John Wiley & Sons, Ltd., 2010.		
Број часова активне наставе	предавања: 60 (4x15)	Студијски истраживачки рад:
Методe извођења наставе Интерактивна предавања и семинарски радови.		

Оцена знања (максимални број поена 100)

Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
Активност у току предавања	1-5	Писмени испит	0-30
Семинарски рад	0-35	Усмени испит	-
Колоквијум	0-30	