



УНИВЕРЗИТЕТ У БАЊОЈ ЛУЦИ  
UNIVERSITY OF BANJA LUKA  
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ  
FACULTY OF NATURAL SCIENCES AND MATHEMATICS



STUDIJSKI PROGRAM HEMIJA

DRUGI CIKLUS STUDIJA – Master hemije

Naziv predmeta	Računarska hemija			
Šifra predmeta	Status predmeta	Semestar	Fond časova	Broj ECTS bodova
2C16HEM013	izborni	I	3+0	5
Nastavnik	Doc. dr Danijela Barić			

Uslovljenost drugim predmetima	Oblik uslovljenosti
/	/

#### Ciljevi izučavanja predmeta

Cilj kursa *Računarska hemija* je sticanje osnovnih znanja i vještina za primjenu računarskih metoda u hemiji, koje predstavljaju najsavremeniji pristup u dizajnu složenih organskih molekula specifične stereochemije i predodređenih svojstava, te proučavanju i predviđanju mehanizama hemijskih reakcija.

#### Ishodi učenja (stečena znanja)

Studenti će biti upoznati sa principima i metodama računarske hemije, osnovima molekuskog modelovanja od značaja za dizajn složenih organskih molekula, kompjuterskim proučavanjem mehanizma organskih reakcija i dizajnom molekula zasnovanom na primjeni kvantno-hemijskih metoda.

#### Sadržaj predmeta

Upoznavanje sa osnovnim alatima potrebnim za hemiju in silico, osnovni pojmovi i definicije u računarskoj hemiji, osnove molekulske mehanike, metoda minimizacije, osnove teorije molekulske orbitala (MO), ab initio MO teorija, skupovi osnovnih funkcija, metoda samousklađenog polja (SCF) i Hartree-Fock teorija, ravan potencijalne energije, optimizacija geometrija, lokalizacija prelaznih stanja, problem elektronske korelacije i post-HF metode, Møller-Plessetova perturbaciona (MP) teorija, opis rastvarača, teorija funkcionalne gustine (DFT) i primjena DFT metoda. Primjeri iz nastavnog gradiva za aktivno učešće studenata.

#### Metode nastave i savladavanje gradiva

Predavanja i računarske vježbe

#### Knjige i drugi nastavni materijal

Christopher J. Cremer, **Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models**, 2nd Edition, John Wiley & Sons, Chichester, 2004.

Andrew R. Leach, **Molecular Modelling: Principles and Applications**, 2nd Edition, Pearson Education Ltd, 2001.

Frank Jensen, **Introduction to Computational Chemistry**, 2nd Edition, John Wiley & Sons, Chichester, 2006.

Interna skripta nastavnika

#### Oblici provjere znanja i ocjenjivanja

Rezultati navedenih provjera znanja ulaze u konačnu ocjenu samo ako prelaze 50% predviđenih bodova za dati oblik provjere u toku semestra.

Seminarski rad	40 бодова	Završni ispit	60 бодова
----------------	-----------	---------------	-----------

#### Posebna naznaka za predmet: /

Ime i prezime nastavnika koji je pripremio podatke	Danijela Barić
--	----------------