



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



СТУДИЈСКИ ПРОГРАМ ХЕМИЈА

ДРУГИ ЦИКЛУС СТУДИЈА – Мастер хемије

Назив предмета	Рачунарска хемија			
Шифра предмета	Статус предмета	Семестар	Фонд часова	Број ЕCTS бодова
2Ц16ХЕМ013	изборни	I	3+0	5
Наставник	доц. др Данијела Барић			

Условљеност другим предметима	Облик условљености
/	/

Циљеви изучавања предмета

Циљ курса *Рачунарска хемија* је стцање основних знања и вјештина за примјену рачунарских метода у хемији, које представљају најсавременији приступ у дизајну сложених органских молекула специфичне стереохемије и предодређених својстава, те проучавању и предвиђању механизма хемијских реакција.

Исходи учења (стечена знања)

Студенти ће бити упознати са принципима и методама рачунарске хемије, основима молекулског моделовања од значаја за дизајн сложених органских молекула, компјутерским проучавањем механизма органских реакција и дизајном молекула заснованом на примјени квантно-хемијских метода.

Садржај предмета

Упознавање са основним алатима потребним за хемију *in silico*, основни појмови и дефиниције у рачунарској хемији, основе молекулске механике, метода минимизације, основе теорије молекулских орбитала (МО), *ab initio* МО теорија, скупови основних функција, метода самоусклађеног поља (SCF) и Hartree-Fock теорија, раван потенцијалне енергије, оптимизација геометрија, локализација прелазних стања, проблем електронске корелације и post-HF методе, Møller-Plessetova пертурбациона (MP) теорија, опис растварача, теорија функционалне густине (DFT) и примјена DFT метода. Примјери из наставног градива за активно учешће студената.

Методе наставе и савладавање градива

Предавања и рачунске вјежбе

Књиге и други наставни материјал

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.

Интерна скрипта наставника.

Облици провјере знања и оцјењивања

Резултати провјера знања улазе у коначну оцјену само ако прелазе 50% предвиђених бодова за дати облик провјере у току семестра.

Семинарски рад	40 бодова	Завршни испит	60 бодова
----------------	-----------	---------------	-----------

Посебна назнака за предмет: /

Име и презиме наставника који је припремио податке: Данијела Барић