



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



STUDIJSKI PROGRAM HEMIJA

PRVI CIKLUS STUDIJA – Opšti smjer/Nastavni smjer

| | | | | |
|----------------|------------------------|----------|-------------|------------------|
| Naziv predmeta | Računarska hemija | | | |
| Šifra predmeta | Status predmeta | Semestar | Fond časova | Broj ECTS bodova |
| 1C16HOS1108 | izborni | VI | 3+0 | 4 |
| 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