



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



СТУДИЈСКИ ПРОГРАМ ХЕМИЈА | ТРЕЋИ ЦИКЛУС СТУДИЈА - ДОКТОРСКЕ СТУДИЈЕ

Назив предмета	Одабрана поглавља хемијске информатике			
Шифра предмета	Статус предмета	Семестар	Фонд часова	Број ECTS бодова
ДХЕМ23ОПИ	изборни	I, II, III или IV	5+0	10
Наставници	проф. др Драган Матић, доц. др Милана Грбић			

Условљеност другим предметима	Облик условљености			
нема	/			
Циљеви изучавања предмета	Циљ курса је да студенти овладају методама за представљање, манипулацију, анализирање и синтетизовање хемијских информација неопходних за научноистраживачки рад студента			
Исходи учења (стечена знања)	Студент: Разумије принципе различитих репрезентација молекула. Разликује и користи различите формате за представљање информација о хемијским структурама. Одабере најпогодније формате за представљање хемијских реакција за примјену различитих рачунарских алата. Користи различите рачунарске алате за обраду хемијских информација. Користи технике програмирања за манипулацију хемијским подацима. Манипулише базама података у којима се похрањују информације о хемијским структурама и њиховим односима. Користи технике вјештачке интелигенције за извлачење корисних информација из хемијских података			
Садржај предмета	*Принципи молекуларне репрезентације: Хемијска и математичка нотација, Специфични типови хемијских структура, Просторна репрезентација хемијских структура. *Рачунарска обрада информација о хемијским структурама: Стандардни формати информација о хемијским структурама, Хемијске структуре као улазно/излазни подаци, Процесирање 3Д структуралних информација. *Рачунарска обрада информација о хемијским реакцијама: Типови реакција, Једначине реакција, Учење из информација о хемијским реакцијама, Базе података о хемијским реакцијама, Класификација хемијских реакција. *Подаци: Типови података, Чување података и управљање подацима *Базе података и извори података у хемији: Основни системи база хемијских података, Базе података о једињењима, Базе података о реакцијама. *Претраживање хемијских структура: Претраживање комплетних структура, Претраживање дијелова структура, Претраживање сличних структура, Претраживање 3Д структура, Претраживање протеинских и аминокиселинских секвенци.			
Методe наставе и савладавање градива	Консултативна настава			
Књиге и други наставни материјал	1. Engel, Thomas, and Johann Gasteiger, eds. Chemoinformatics: basic concepts and methods. John Wiley & Sons, 2018. 2. Varnek, Alexandre, ed. Tutorials in chemoinformatics. John Wiley & Sons, 2017.			
Облици провјере знања и оцјењивања	Семинарски рад, Завршни пројекат			
Семинарски рад	40			
		Завршни испит	60	
Посебна назнака за предмет				
Име и презиме наставника који је припремио податке	проф. др Драган Матић, др Милана Грбић			