
	УНИВЕРЗИТЕТ У БАЊОЈ ЛУЦИ ПРИРОДНО- МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ		
	I циклус студија		
	Студијски програм:	Хемија Наставни смјер / Општи смјер	

Назив предмета	Рачунарска хемија			
Шифра предмета	Статус предмета	Семестар	Фонд часова	Број ECTS бодова
СПХОНИ166РХ	изборни	VI	3+0	4
Наставници	Доц. др Данијела Барић, Институт Руђер Бошковић, Загреб			
Условљеност другим предметима:			Облик условљености	
Циљеви изучавања предмета:				
<p>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.</p>				
Исходи учења (стечена знања):				
<p>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.</p>				
Садржај предмета:				
<p>Упознавање са основним алатима потребним за хемију <i>in silico</i>, основни појмови и дефиниције у рачунарској хемији, основе молекулске механике, метаода минимизације, основе теорије молекулских орбитала (MO), <i>ab initio</i> MO 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.</p>				
Методe наставe и савладавање градива:				
Предавања				
Литература:				
<p>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.</p>				
Облици провјере знања и оцјењивања:				
Колоквијуми. Писмени испит.				
Колоквијум:	15 бодова	Активност на настави:	10 бодова	
Тест:	15 бодова	Завршни испит:	60 бодова	
Посебна назнака за предмет:				
Име и презиме наставника који је припремио податке: Данијела Барић				