

Studijski program		Vrsta studija (ciklus)	Treći ciklus			
		Naziv studijskog programa	HEMIJA			
<b>PREDMET</b>						
Naziv predmeta		<b>KOMPUTACIJSKA HEMIJA</b>				
Šifra predmeta	Semestar	Status predmeta	ECTS bodovi	Kontakt sati		
<b>HDOA16</b>	I	izborni	15			
Obavezni prethodno položeni predmeti						
Nastavnici i saradnici	Nosilac predmeta					
	Učesnici u nastavi					
Ciljevi predmeta	Upoznavanje sa teorijom i primjenom komputacijskih metoda, modeliranje struktura molekula i reakcionih mehanizama					
Sadržaj predmeta						
#	Nastavna jedinica	Kontakt sati				
		P	V	S	K	
1.	Komputacioni modeli, teorijske osnove. Optimizacijske metode: ab initio, semi empiričke metode, molekularna mehanika. Simuliranje spektra Vizualizacija struktura  Programi : Gaussian, Spartan, PyMol, AutoDoc					
2.	Predviđanje molekulske strukture malih molekula i njihovih reaktivnosti ,modeliranjem prijelaznih struktura, i međumolekulska međudjelovanja					
3.						
<b>OPTEREĆENJE STUDENTA (sati)</b>						
Kontakt sati		Laboratorijske vježbe			Priprema ispita	
Literatura – čitanje		Pisani radovi		Ostalo (navesti)	UKUPNO	
<b>LITERATURA</b>			<b>PROVJERA ZNANJA I OCJENJIVANJE</b>			
1. C.C. Cramer,,: Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, Wiley, NY, 2 <sup>nd</sup> Ed, 2006 2. J.B.Foresman, E. Frish:Exploring chemistry with electronic structure method, Gaussian Inc. Pittsburg, PA, 2000 3. Interna skripta			Kriterij	Poeni	Uslov	
			1.	Testovi	1 X 20	11
			2.	Seminarski radovi	1 X 40	22
			3	Završni ispit	40	22
			U k u p n o		100	55