

| Studijski program | | Vrsta studija (ciklus) | Drugi ciklus | | | |
|--|---|--|--|-----------------|-----|--|
| | | Naziv studijskog programa | Hemija – opšti smjer, kontrola kvaliteta i zaštita okoliša | | | |
| PREDMET | | | | | | |
| Naziv predmeta | | Uvod u hemijsku teoriju grafova | | | | |
| Šifra predmeta | Semestar | Status predmeta | ECTS bodovi | Kontakt sati | | |
| HFHI03 | Prvi | Izborni | 4 | 60 | | |
| Obavezni prethodno položeni predmeti | | | | | | |
| Nastavnici i saradnici | Nosilac predmeta | Prof. dr. Sabina Gojak-Salimović | | | | |
| | Učesnici u nastavi | Doc. dr. Jelena Ostojić | | | | |
| Ciljevi predmeta | Sticanje znanja o osnovnim pojmovima i najvažnijim primjenama teorije grafova u hemiji. | | | | | |
| Sadržaj predmeta | | | | | | |
| # | Nastavna jedinica | Kontakt sati | | | | |
| | | P | V | S | K | |
| 1. | Grafovi i molekularni grafovi | 45 | 15 | | | |
| 2. | Za hemiju značajne vrste grafova. | | | | | |
| 3. | Za hemiju značajni pojmovi teorije grafova. | | | | | |
| 4. | Grafovi i matrice. Spektri grafova. | | | | | |
| 5. | Stabla i hemijska stabla | | | | | |
| 6. | Osnovne osobine stabala. Ekstremna stabla. | | | | | |
| 7. | Benzenoidni sistemi | | | | | |
| 8. | Osnovne strukturne karakteristike benzenoidnih sistema. | | | | | |
| 9. | Matematički aspekti Clarove teorije. | | | | | |
| 10. | Prebrojavanje grafova i izomera. Teorija prebrojavanja. | | | | | |
| 11. | Molekularski i strukturni deskriptori | | | | | |
| 12. | Primjena strukturnih deskriptora – QSPR i QSAR. Primjeri iz prakse. | | | | | |
| 13. | Teorija grafova i molekularne orbitale | | | | | |
| 14. | Veza HMO teorije i spektralne teorije grafova. | | | | | |
| 15. | Ukupna π -elektronska energija. | | | | | |
| OPTEREĆENJE STUDENTA (sati) | | | | | | |
| Kontakt sati | 60 | Praktični rad | Seminari | Priprema ispita | 20 | |
| Literatura - čitanje | 20 | Pisani radovi | Ostalo (navesti) | UKUPNO | 100 | |
| LITERATURA | | | PROVJERA ZNANJA I OCJENJIVANJE | | | |
| 1. I. Gutman, Uvod u hemijsku teoriju grafova, PMF Kragujevac, 2003 2. M. Randić, Aromaticity of Polycyclic Conjugated Hydrocarbons, Chemical Reviews, 103, 3449-3605, 2003 3. I. Gutman, S. J. Cyvin, Introduction to the Theory of Benzenoid Hydrocarbons, Springer-Verlag, Berlin, 1989 | Kriterij | Poeni | Uslov | | | |
| | 1. Urednost pohađanja nastave | 5 | 3 | | | |
| | 2. Aktivnost na nastavi | 15 | 8 | | | |
| | 3. Testovi | 2*20 | 2*11 | | | |
| | 4. Završni ispit | 40 | 22 | | | |
| U k u p n o | | 100 | 55 | | | |
| Napomene: Aktivnost na nastavi se boduje kroz rad studenata na vježbama. | | | | | | |