

Molekulsko modeliranje 1

- **Fond časova:** 2+2, VIII semestar
- **Predmetni nastavnik:** prof. dr Svetlana Marković
- **Saradnik na predmetu:** Izudin Redžepović

- **Vežbe** su računarske. Koriste se programi **Gaussian** i **GaussView** (svaki student će moći da ih instalira i na svom računaru) pomoću kojih se simuliraju različiti hemijski fenomeni, prvenstveno hemijske reakcije. Otkrivanje strukture i energije prelaznih stanja omogućava termodinamička i kinetička izračunavanja vezana za modeliranu hemijsku reakciju.

Kako će se formirati ocena?

- Odrađene vežbe – 10 poena
- 2 testa u toku semestra (ili 1 u ispitnom roku) – 60 poena
- Seminarski rad: modelirati jednostavan hemijski problem uz pomoć profesora i asistenta – 30 poena

