

Molekulsko modeliranje

Testovi za ovaj predmet su iz sledećih oblasti:

1. Uvod u molekulske modeliranje
2. Površina potencijalne energije
3. Stacionarne tačke i prelazno stanje
4. Mehanizmi hemijskih reakcija
5. Podela teorijski metoda: molekulske mehaničke metode, kvantno mehaničke metode
6. Optimizacija geometrije (kriva potencijalne energije, višedimenzionalan površina potencijalne energije i Hesova matrica)
7. Ravnotežna geometrija i njena potvrda
8. Optimizacija prelaznih stanja, reakcije bez prelaznih stanja i potvrda prelaznih stanja
9. Kvantna mehanika: hamiltonijan, aproksimacija Šredingerove jednačine, Born-Openhajmerova aproksimacija, ograničenja talasne funkcije, Slejterova determinanta, Hartri-Fockova aproksimacija, linearna kombinacija atomskih orbitala, Rothan-Holove jednačine, SCF procedura, metode otvorene ljuske
10. Semiempirijske metode
11. Koorelacije elektrona
12. Moler-Plesetovi modeli,
13. Teorija Funkcionala gustine-Kon Šamova procedura: funkcionali zamene/korelacije, lokalna aproksimacija gustine i spinske gustine, aproksimacija generalizovanog gradijenta, aproksimacija generalizovanog gradijenta, aproksimacija generalizovanog gradijenta i hibridni meta funkcionali
14. Bazisni setovi : Slejterove orbitale, gausijanske orbitale, kontrahivane gausijanske funkcije, minimalan bazisni set, bazisni setovi podeljene valence, dvostruki zeta bazisni set podeljene valence, trostruki zeta bazisni set podeljene valence, polarizovani bazisni setovi, difuzne funkcije i korelaciono konzistentni bazisni setovi
15. Grafički modeli: izopovršine, molekulske orbitale, gustina elektrona, spinska gustina, elektrostatički potencijal i lokalni jonizacioni potencijal

Preporučena literatura:

1. S. Marković, Z. Marković: Molekulsko modeliranje, Centar za naučno-istraživački rad SANU i Univerziteta u Kragujevcu, 2012. ISBN 978-86-81037-32-4,.

Pomoćna literatura:

1. The Molecular Modeling Workbook for Organic Chemistry, W.J. Hehre, A.J. Shusterman, J.E. Nelson, Wavefunction, Inc., 1998. ISBN 1-890661-06-6
2. Essentials of Computational Chemistry-Theories and Models, 2nd Edition, Christopher J. Cramer, John Wiley & Sons, Ltd., 2004. ISBN 0-471-48552-7
3. Tutorial and User's Guide, USA: Spartan '10, Wavefunction, Inc., Irvine, CA, 2011. ISBN 978-1-890661-41-4