



Назив предмета: ХЕМОИНФОРМАТИКА		
Статус предмета: Изборни		
Број ЕСПБ: 15		
Услов: Уписан одговарајући семестар		
Циљ предмета Циљ овог предмета је да упозна студенте са основним хемоинформатичким методама и алатима који се користе за решавање различитих хемијских проблема. Компјутери су олакшали и убрзали развој многих научних дисциплина, па и хемије. Студенти ће бити упознати са хемоинформатичким алгоритмима који решавају или олакшавају решавање проблема који се јављају неорганској, аналитичкој, органској хемији и биохемији.		
Исход предмета Оспособљавање студената за коришћење хемоинформатичких метода у хемијским истраживањима. Студент који успешно савлада све предметом предвиђене области, моћи ће рутински да користити хемијске базе података и софтвер зарад повећања ефикасности у раду. Надаље, биће упознат са теоријским концептима на којима су засновани многи хемоинформатички поступци, што ће му дати увид у предности и лимите коришћења истих.		
Садржај предмета Оспособљавање студената за коришћење хемоинформатичких метода у хемијским истраживањима. Студент који успешно савлада све предметом предвиђене области, моћи ће рутински да користити хемијске базе података и софтвер зарад повећања ефикасности у раду. Надаље, биће упознат са теоријским концептима на којима су засновани многи хемоинформатички поступци, што ће му дати увид у предности и лимите коришћења истих.		
Препоручена литература 1. J. Gasteiger (Ed.), <i>Handbook of Chemoinformatics – From Data to Knowledge</i> , Wiley, Weinheim, 2003. 2. J. Vajorath (Ed.), <i>Chemoinformatics – Concepts, Methods, and Tools for Drug Discovery</i> , Humana Press, Totowa, 2004. 3. R. Todeschini, V. Consonni, <i>Molecular Descriptors for Chemoinformatics</i> , Wiley, Weinheim, 2009. 4. I. Gutman, <i>Uvod u hemijsku teoriju grafova</i> , PMF Kragujevac, Kragujevac, 2003. 5. P. Gempel (Ed.), <i>Practical Guide to Chemometrics</i> , Taylor & Francis, Boca Raton, 2006.		
Број часова активне наставе	Теоријска настава: 6	Студијски истраживачки рад:
Методе извођења наставе Предавања, семинарски радови.		
Оцена знања (максимални број поена 100) Активност у току предавања: 10, Семинар(и): 40, Писмени испит: 30, Усмени испит: 20.		