

Studijski program		Vrsta studija (ciklus)	Drugi ciklus			
		Naziv studijskog programa	Hemija – opći smjer			
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	Doc. dr. Sabina Gojak				
	Učesnici u nastavi					
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	3	1			
2.	Za hemiju značajne vrste grafova.	3	1			
3.	Za hemiju značajni pojmovi teorije grafova.	3	1			
4.	Grafovi i matrice. Spektri grafova.	3	1			
5.	Stabla i hemijska stabla	3	1			
6.	Osnovne osobine stabala. Ekstremna stabla.	3	1			
7.	Benzenoidni sistemi	3	1			
8.	Osnovne strukturne karakteristike benzenoidnih sistema.	3	1			
9.	Matematički aspekti Clarove teorije.	3	1			
10.	Prebrojavanje grafova i izomera. Teorija prebrojavanja.	3	1			
11.	Molekularni i strukturni deskriptori	3	1			
12.	Primjena strukturnih deskriptora – QSPR i QSAR. Primjeri iz prakse.	3	1			
13.	Teorija grafova i molekulske orbitale	3	1			
14.	Veza HMO teorije i spektralne teorije grafova.	3	1			
15.	Ukupna π -elektronska energija.	3	1			
OPTEREĆENJE STUDENTA (sati)						
Kontakt sati	60	Praktični rad		Seminari	Priprema ispita	
Literatura – čitanje		Pisani radovi		Ostalo (navesti)	UKUPNO	
					100	
LITERATURA			PROVJERA ZNANJA I OCJENJIVANJE			
1. I. Gutman, Uvod u hemijsku teoriju grafova, PMF Kragujevac, 2003 2. E. Clar, The aromatic Sextet, Wiley, London 3. I. Gutman, S. J. Cyvin, Introduction to the Theory of Benzenoid Hydrocarbons, Springer-Verlag, Berlin, 1989			Kriterij	Poeni	Uslov	
			1.	Urednost pohađanja i angažman na nastavi	5	3
			2.	Testovi tokom kursa (pismeni)	2x20	2x11
			3.	Računske vježbe	15	8
			4.	Laboratorijske vježbe (kolokvij - usmeni)		
			5.	Završni ispit (pismeni)	40	22
U k u p n o			100	55		
Napomene:						