

Табела 5.2. Спецификација предмета

Студијски програм: Мастер академске студије Физичка хемија			
Назив предмета: Моделирање хемијских реакција загађивача у животној средини			
Наставник: Петковић Милена			
Статус предмета: Изборни			
Број ЕСПБ: 7			
Услов: Нема			
Циљ предмета Да студенти науче на који начин, којом методологијом и којим техникама се врши теоријска анализа својстава загађивача и хемијских реакција у којима учествују.			
Исход предмета Студент ће бити оспособљен за теоријску анализу структуре и својстава загађивача. Моћи ће да прати промене до којих долази током хемијских трансформација загађивача: да процени баријере за одвијање мономолекулских и бимолекулских реакција, као и промене одабраних термодинамичких величина које прате хемијску реакцију.			
Садржај предмета <i>Теоријска настава</i> Физички, емпиријски, математички модели. Врсте математичких модела. Хемијске реакције у атмосфери-Испитивање структуре и својстава загађивача. Анализа токова хемијских реакција у којима учествују загађивачи у основном и побуђеним електронским стањима. Међумолекулске интеракције и уклањање загађивача. <i>Практична настава</i> Испитивање ширења загађења и структуре загађивача коришћењем програмског пакета MATLAB. Анализа структуре и својстава загађивача, као и хемијских трансформација помоћу програма Gaussian.			
Литература 1. N. Nirmala Khandan, Modeling Tools for Environmental Engineers and Scientists, CRC Press, 2002. 2. L. Vereecken, J. S. Francisco, <i>Theoretical studies of atmospheric reaction mechanisms in the troposphere</i> , Chem. Soc. Rev. 2012, 41, 6259-6293 3. М. Петковић, Физичка хемија флуида: од међумолекулских интеракција, до макроскопских својстава, Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију, 2017.			
Број часова активне наставе	Теоријска настава: 2	Практична настава: 4	
Методe извођења наставе Предавања, консултације, теоријске вежбе, семинарски рад.			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
активност у току предавања		писмени испит	
практична настава		усмени испит	50
колоквијум-и			
семинар-и	50		