



UČNI NAČRT PREDMETA / SUBJECT SPECIFICATION

Predmet:	Matematika v kemiji
Subject Title:	Mathematics in chemistry

Študijski program Study programme	Študijska smer Study field	Letnik Year	Semester Semester
Izobraževalna kemija Educational Chemistry		3.	zimski Autumn

Univerzitetna koda predmeta / University subject code:

Predavanja Lectures	Seminar Seminar	Sem. vaje Tutorial	Lab. vaje Labor work	Teren. vaje Field work	Samost. delo Individ. work	ECTS
20		10			150	6

Nosilec predmeta / Lecturer: doc. dr. Petra Žigert

Jeziki /	Predavanja / Lecture:	Slovensko
Languages:	Vaje / Tutorial:	Slovensko

Pogoji za vključitev v delo oz. za opravljanje študijskih obveznosti:

Matematika, Organska kemija I

Prerequisites:

Mathematics, Organic chemistry I

Vsebina:

- **Matrični račun:**
matrike in računске operacije na matrikah, obratna matrika, računanje determinante matrike, reševanje sistemov linearnih enačb
- **Osnove teorije grafov:**
definicija grafa, izomorfni grafi, posebne vrste grafov, sosednostna matrika, matrika razdalj, spekter grafa.
- **Molekulski grafi:**
matematični model ogljikovodikov, aciklični grafi, karakteristični polinom, benzenoidni grafi.
- **Topološki indeksi:**
vloga topoloških indeksov, Wienerjev indeks, Szegedški indeks, Randićev indeks, Hosojev indeks in Hosoyev polinom, hiper-Wienerjev indeks, osnove QSAR, QSPR.
- **Resonančne strukture:**
Kekulejeve strukture in metode za njihov izračun, Clarove strukture in Clarovo število, struktura resonančnih grafov, Fibonaccijeve kocke.

Content (Syllabus outline):

- **Matrix calculation**
matrices and operations with matrices, inverse matrix, calculation of the determinant, methods of solving of systems of linear equations.
- **Fundamentals of graph theory:**
definition of a graph, isomorphic graphs, special graphs, matchings, adjacency matrix, distance matrix, spectrum of a graph.
- **Molecular graphs:**
mathematical model of hydrocarbons, acyclic graphs, characteristic polynomial, benzenoid graphs.
- **Topological indices:**
role of the topological indices, Wiener index, Szeged index, Randić index, Hosoya index and Hosoya polynomial, hyper-Wiener index, basic ideas of QSAR, QSPR.
- **Resonance structures:**
Kekule structures and the methods for their calculation, Clar structures and Clar number, structure of the resonance graphs, Fibonacci cubes.

Temeljni literatura in viri / Textbooks:

- Ivan Gutman, Sven J. Cyvin, Introduction to theory of benzenoid hydrocarbons, Berlin, Springer-Verlag, 1989,
- Ivan Gutman, Oskar R. Polansky, Mathematical concepts in organic chemistry, Berlin, Springer-Verlag, 1986,
- Sandi Klavžar, Petra Žigert, Izbrana poglavja uporabne matematike, Maribor, Pedagoška fakulteta, 2002.
- Petra Žigert, Matematika za študente VS programa, FKKT Maribor, v pripravi – predvidena izdaja v

septembru 2008.

Cilji:

- študent naj pridobi in utrdi osnovna znanja matričnega računa in teorije grafov in jih zna aplicirati pri reševanju problemov s področja kemije,
- študent naj spozna matematični model strukture nekaterih ogljikovodikov in vlogo topoloških indeksov.

Objectives:

- the student should gain and establish the basic mathematical knowledge about matrix calculation and graph theory and knows how to use it in solving chemical problems,
- the student is familiar with the mathematical model of structure of some hydrocarbons and the use of topological indices.

Predvideni študijski rezultati:**Znanje in razumevanje:**

- študent pozna osnove teorije grafov in jih zna prenesti na matematično modeliranje strukture nekaterih ogljikovodikov,
- študent zna izračunati nekatere topološke indekse ogljikovodikov,
- študent pozna rezonačne grafe in zna poiskati število Kekulejevih struktur ter Clarovo število.

Prenesljive/ključne spretnosti in drugi atributi:

- matematično modeliranje v organski kemiji,
- interdisciplinarnost matematike in kemije.

Intended learning outcomes:**Knowledge and Understanding:**

- the student is familiar with the basic concepts of graph theory and knows how to use them in the mathematical modeling of structure of some hydrocarbons,
- the student knows how to calculate some topological indices of hydrocarbons,
- the student is familiar with the resonance graphs and can find the number of Kekule structures and Clar number.

Transferable/Key Skills and other attributes:

- mathematical modeling in the organic chemistry,
- interdisciplinarity of mathematics and chemistry.

Metode poučevanja in učenja:

- predavanja in seminarsko delo.

Learning and teaching methods:

- lectures and a seminar work.

Načini ocenjevanja:

Način (pisni izpit, ustno izpraševanje, naloge, projekt)

- seminarska naloga,
- ustni izpit.

Delež (v %) /
Weight (in %)

20%
80%

Assessment:

Type (examination, oral, coursework, project):

- a seminar work,
- an oral exam.

Materialni pogoji za izvedbo predmeta :

- računalnik in projektor

Material conditions for subject realization

- a computer with the projector

Obveznosti študentov:

(pisni, ustni izpit, naloge, projekti)

Students' commitments:

(written, oral examination, coursework, projects):

<ul style="list-style-type: none">• seminarska naloga in prisotnost na predstavilih seminarских nalog,• ustni izpit.	<ul style="list-style-type: none">• a seminar work and presence at the seminar work presentations,• an oral exam.
---	--

Opomba: Navedene sestavine so obvezna sestavina učnega načrta predmeta kot ga določajo Merila za akreditacijo visokošolskih zavodov in študijskih programov v 7. členu (Ur. l. RS, št. 101/2004).