

Centar za naučnoistraživački rad
Srpske akademije nauka i umetnosti
i Univerziteta u Kragujevcu

Zamoljeni smo da za potrebe Centra recenziramo rukopis monografije "*Molekulsko modeliranje*" autora Svetlane Marković i Zorana Markovića. Nakon što smo pregledali rukopis, podnosimo sledeći

I Z V E Š T A J

Rukopis Svetlane i Zorana Marković odnosi se na modeliranje hemijskih pojava pomoću metoda kvantne teorije, uz ekstenzivnu primenu računara. Bez obzira što su fizički i matematički temelji kvantne hemije postavljeni pre bezmalo sto godina, proračuni na konkretnim i za hemiju interesantnim sistemima poslati su mogući relativno nedavno, kada su se pojavili dovoljno brzi i svima dostupni računari, i kada su napisani odgovarajući, hemičarima prilagođeni, softverski paketi. Danas se ova mlada grana nauke naziva "*kompjuterska hemija*" ili – kao što su autori učinili – "*molekulsko modeliranje*". Ova naučna disciplina je danas u velikom usponu, tim pre što se pomoću nje mogu istraživati hemijski problemi u slučajevima kada su laboratorijska ispitivanja preskupa, nepraktična ili nemoguća. Kao što autori kažu u uvodu: *Molekulsko modeliranje objedinjuje teorijske metode i kompjutersku tehniku, te dizajnira modele hemijskih interakcija, i simulira ponašanje hemijskih sistema – molekula i hemijskih reakcija.*

Sa oduševljenjem konstatujemo da su ovo dvoje autora, koji obavljaju naučna istraživanja u oblasti molekulskog modeliranja na svetskom nivou, sada pripremili monografiju o ovoj temi na našem jeziku. Koliko je nama poznato, na našem jeziku ne postoji ništa slično "*Molekulskom modeliranju*" Svetlane i Zorana Marković.

Knjiga "*Molekulsko modeliranje*" ima 305 strana i gradivo u njoj je podeljeno na osam poglavlja: 1. Površina potencijalne energije, 2. Teorijski modeli, 3. Grafički

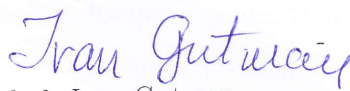
modeli, 4. Optimizacija geometrije, 5. Vibracione frekvencije i termohemijske veličine, 6. Reakcione energije, 7. Ravnotežne konformacije, 8. Simuliranje hemijskih spektara pomoću softvera za molekulsko modeliranje. Slede dva priloga: 1. Fizičke konstante i konverzioni faktori, i 2. Grčki alfabet. Na kraju se nalazi spisak od preko 130 citiranih knjiga i radova, i indeks. Mnogi od citiranih radova jesu radovi samih autora, objavljeni u renomiranim naučnim časopisima.

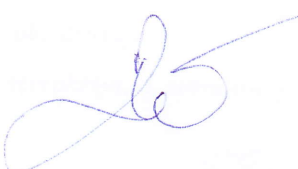
Po našem mišljenju, monografija "*Molekulsko modeliranje*" je jedno kapitalno delo, jedinstveno u Srbiji (a i znatno šire).

Autorima smo skrenuli pažnju na potrebu nekih manjih modifikacija, što su oni učinili.

Imajući u vidu sve navedeno, predlažemo da Centar za naučnoistraživački rad Srpske akademije nauka i umetnosti i Univerziteta u Kragujevcu monografiju "*Molekulsko modeliranje*" objavi u okviru svoje izdavačke delatnosti. Nema sumnje da će se ova knjiga koristiti kao udžbenik kako na kragujevačkom tako i na drugim univerzitetima u Srbiji, a moguće i izvan Srbije.

U Kragujevcu, 6. februara 2012.


Prof. dr Ivan Gutman


Prof. dr Zoran Matović