



Sveučilište u Rijeci
University of Rijeka



Detaljni izvedbeni nastavni plan za kolegij:
Fizikalno-organska i računska kemija

Akadska godina: 2019/2020

Studij: Medicinska kemija

Kod kolegija: MK102

ECTS bodovi: 6

Jezik na kojem se izvodi kolegij: Hrvatski/engleski

Nastavno opterećenje kolegija: 55 sati (40P + 15S)

Preduvjeti za upis kolegija: položen završni ispit iz kolegija Organska kemija

Nositelj kolegija i kontakt podaci:

Titula i ime: Izv. Prof. Dean Marković

Adresa: O-210

tel: 584-816

e-mail: dean.markovic@uniri.hr

Asistent:

Titula i ime Mr. Sc. Dario Matulja

Adresa: O-147

tel:

e-mail: dario.matulja@biotech.uniri.hr

Vrijeme konzultacija: srijedom 9-12h

Obavezna literatura:

1. E. Anslyn, D. Dougherty, *Modern Physical Organic Chemistry*, University Science Books, Sausalito, 2006.
2. H. Maskill, (Ed.), *Investigation of Organic Reactions and Their Mechanisms*, Blackwell, Oxford, 2006.
3. F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, second edition, John Wiley & Sons, Chichester, 2007.
4. D. Frenkel, B. Smit, *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*,



Academic Press, N. York, 1996.

Preporučena dodatna literatura (izborna):

1. H. Maskill, *Mechanisms of Organic Reactions*, Oxford university press, New York, 1996.
2. E. J. Corey, B. Czako, L. Kürti, *Molecules and Medicine*, Wiley, Hoboken, 2007.
3. P. M. Dewick, *Essentials of Organic Chemistry: For Students of Pharmacy, Medicinal Chemistry and Biological Chemistry*, Wiley, New York, 2006.
4. R. B. Silverman, *Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action*, Elsevier/Academic Press, 2nd Ed., Amsterdam, 2004.
5. C. J. Cramer, *Essentials of Computational Chemistry-Theories and Models*, 2nd Edition, John Wiley & Sons, 2004.
6. D. C. Young, *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems*, John Wiley & Sons, 2001.

Opis predmeta (sažetak i ciljevi kolegija):

Upoznati studente s temeljnim principima fizikalno organske i računske kemije i njihovom primjenom u planiranju sinteze potencijalnih lijekova i razumijevanju međudnosa fizičko kemijskih i bioloških svojstava aktivnih komponenti lijekova.

Okvirni sadržaj kolegija:

- osnove fizikalno-organske kemije
- mehanizmi organskih reakcija i metode istraživanja reakcijskih mehanizama
- utjecaj strukturnih i elektronskih faktora na svojstva molekula i kemijsku reaktivnost
- kiseline i baze i njihova primjena u katalizi organskih reakcija
- uvod u računsku kemiju (molekulska mehanika, kvantna mehanika, molekulska dinamika)
- kratki pregled računskih metoda
- primjena računskih metoda u istraživanju svojstava molekula i reakcijskih mehanizama

Ishodi učenja:

Polaznici će biti osposobljeni za primjenu fizikalno-organske i računske kemije u dizajnu potencijalnih lijekova i njihovoj sintezi.

Detaljni sadržaj kolegija (teme/naslovi predavanja, seminara i vježbi):

A. *Predavanja* (2h svako predavanje):

- P1. Uvod: Fizikalno-organska kemija- obveze studenata
P2. Osnove termodinamike (Doc Duško Čakara)
P3. Struktura i modeli vezivanja
P4. Nekovalentne interakcije
P5. Energetske površine i srodni koncepti
P6. Računalna kemija



- P7. Teorija prijelaznih stanja
- P8. Reakcijski mehanizmi
- P9. Reaktivni intermedijeri
- P10. Kolokvij
- P11. Kinetika
- P12. Izotopni efekti
- P13. Supstitucijski efekti - LFER
- P14. Kiseline i baze
- P15. Kataliza
- P16. Pericikličke reakcije
- P17. Supramolekularna kemija
- P18. Hiperkonjugacija, homokonjugacija
- P19. Orbitalne interakcije kroz prostor i kroz veze
- P20. Završni ispit

B. Seminari (1h svaki seminar):

- S1. Termodinamika organskih reakcija
- S2. Struktura i modeli vezivanja
- S3. Teorija prijelaznog stanja
- S4. Reakcijski mehanizmi
- S5. Karbokationi
- S6. Karbanioni
- S7. Karbeni
- S8. Arini
- S9. Radikali i antioksidansi
- S10. Nekovalentne interakcije
- S11. Supramolekulska kemija
- S12. Supstitucijski efekti
- S13. Bazičnost
- S14. Stereoelektronski efekti

Obveze, način praćenja i vrednovanje studenata:

Redovito pohađati predavanja i seminare. Napisati te na vrijeme predati i prezentirati seminarski rad. Položiti pismeni dio ispita.

Ispitni rokovi:

1. ispitni rok održat će se (definirati datum, mjesto i vrijeme). 15.06. O-269, 12.00-15.00h
2. ispitni rok održat će se (definirati datum, mjesto i vrijeme). 16.07. O-269, 12.00-15.00h
3. ispiti rok održati će se u lipnju prema dogovoru sa studentima
4. ispitni rok održati će se u rujnu prema dogovoru sa studentima

Formiranje ocjene (prema Pravilniku o studijima Sveučilišta u Rijeci):



Na primjeru kolegija u kojem studenti tijekom kontinuirane nastave mogu steći maksimalno 50% ocjenskih bodova, a na završnom ispitu 50%. Studenti koji su tijekom kontinuiranog dijela nastave ostvarili:

- od 0 do 24,9% ocjenskih bodova ne mogu pristupiti završnom ispitu
- više od 25% ocjenskih bodova mogu pristupiti završnom ispitu.

Prema postignutom ukupnom broju ocjenskih bodova dodjeljuju se sljedeće konačne ocjene:

Postotak usvojenog znanja i vještina	ECTS ocjena	Brojčana ocjena
90% do 100%	A	Izvrstan (5)
75% do 89,9%	B	Vrlo dobar (4)
60% do 74,9%	C	Dobar (3)
50% do 59,9%	D	Dovoljan (2)
0% do 49,9%	F	Nedovoljan (1)

Konačna ocjena je zbroj bodova ostvarenih tijekom nastave i bodova ostvarenih na završnom ispitu, a prolazne ocjene su izvrstan (5), vrlo dobar (4), dobar (3) i dovoljan (2).

Raspored nastave (primjer tablice):

Datum	Grupa	Vrijeme	Broj sati nastave	Mjesto	Oblik nastave	Izvođač
20.04.2019.	svi	9-12 h	2	O-268	P1	DM
21.04.2019.	svi	9-12 h	2	O-268	P2	DM
22.04.2019.	svi	9-13 h	3	O-268	P3+S1	DM(P) + DMat(S)
23.04.2019.	svi	9-13 h	3	O-268	P4+S2	DM(P) + DMat(S)
24.04.2019.	svi	11.30- 15.30 h	3	O-269	P5+S3	DM(P) + DMat(S)
27.04.2019.	svi	9-13 h	3	O-268	P6+S4	DM(P) + DMat(S)
28.04.2019.	svi	12-16 h	3	O-269	P7+S5	DM(P) + DMat(S)
29.04.2019.	svi	9-13 h	3	O-268	P8+S6	DM(P) + DMat(S)



30.04.2019.	svi	10.30-14.30 h	3	O-268	P9+S7	DM(P) + DMat(S)
04.05.2019.	svi	9-13 h	3	O-268	Kolokvij	Dean Marković
05.05.2019.	svi	9-13 h	3	O-268	P10+S8	DM(P) + DMat(S)
06.05.2019.	svi	9-13 h	3	O-268	P11+S9	DM(P) + DMat(S)
07.05.2019.	svi	9-13 h	3	O-268	P12+S10	DM(P) + DMat(S)
08.05.2019.	svi	9-13 h	3	O-268	P13+S11	DM(P) + DMat(S)
11.05.2019.	svi	9-13 h	3	O-268	P ₄ +S12	DM(P) + DMat(S)
12.05.2019.	svi	9-13 h	3	O-268	P15+P16+S1 3	DM(P) + DMat(S)
13.05.2019.	svi	9-13 h	3	O-268	P17+P18+S1 4	DM(P) + DMat(S)
14.05.2019.	svi	9-14 h	3	O-268	P19+S14	DM(P) + DMat(S)
15.05.2019.	svi	9-12 h	3	O-268	Završni ispit	Dean Marković

Dodatne informacije:

Akadska čestitost

Studenti su dužni poštovati načela akademske čestitosti te se upućuju na dokumente Sveučilišta u Rijeci: *Etički kodeks Sveučilišta u Rijeci* te *Etički kodeks za studente*.