



Sveučilište u Rijeci
University of Rijeka



Detaljni izvedbeni nastavni plan za kolegij:

Fizikalno-organska i računska kemija

Akadska godina: 2020/2021

Studij: Medicinska kemija

Kod kolegija: MK102

ECTS bodovi: 6

Jezik na kojem se izvodi kolegij: Hrvatski/engleski

Nastavno opterećenje kolegija: 51 sati (40P + 11S)

Izv. Prof. Dean Marković 40h Predavanja

Dario Matulja, mag. med. chem. 11h Seminari

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 Dario Matulja, mag. med. chem.

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 međuodnosa 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:*

- P1. Uvod: Fizikalno-organska kemija- obveze studenata
P2. Osnove termodinamike
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.

B. Seminari:

- S1. Termodinamika organskih reakcija i struktura i modeli vezivanja
- S2. Nekovalentne interakcije
- S3. Energetske površine i srodni koncepti
- S4. Teorija prijelaznog stanja
- S5. Reakcijski mehanizmi i reaktivni intermedijeri
- S6. Kinetika
- S7. Izotopni efekti i supstitucijski efekti - LFER
- S8. Kiseline i baze i kataliza
- S9. Pericikličke reakcije i supramolekularna kemija
- S10. Supramolekularna kemija i hiperkonjugacija, homokonjugacija
- S11. Orbitalne interakcije kroz prostor i kroz veze

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). 14.05. online ili O-030, 12.00-15.00h
2. ispitni rok održat će se (definirati datum, mjesto i vrijeme). 24.05. online ili O-030, 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):



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
19.04.2021.	svi	9-11 h	2	O-268	P1	DM(P)
20.04.2021.	svi	9-11 h	2	O-268	P2	DM(P)
21.04.2021.	svi	9-11 h	2	O-268	P3	DM(P)
21.04.2021.	svi	12-13 h	1	O-268	S1	DMat(S)
22.04.2021.	svi	9-11 h	2	O-268	P4	DM(P)
22.04.2021.	svi	12-13 h	1	O-268	S2	DMat(S)
23.04.2021.	svi	9-11 h	2	O-268	P5	DM(P)
23.04.2021.	svi	12-13 h	1	O-268	S3	DMat(S)



26.04.2021.	svi	9-11 h	2	O-268	P6	DM(P)
27.04.2021.	svi	12-14 h	2	O-269	P7	DM(P)
27.04.2021.	svi	15-16 h	1	O-269	S4	DMat(S)
28.04.2021.	svi	9-11 h	2	O-268	P8	DM(P)
28.04.2021.	svi	9-11 h	2	O-268	P9	DM(P)
29.04.2021.	svi	9-11 h	2	O-268	P10	DM(P)
29.04.2021.	svi	11-12 h	1	O-268	S5	DMat(S)
30.04.2021.	svi	1030-1230 h	2	O-268	P11	DM(P)
03.05.2021.	svi	9-12 h	3	O-030	Kolokvij	Dean Marković
04.05.2021.	svi	9-11 h	2	O-030	P12	DM(P)
04.05.2021.	svi	1330-1430 h	1	O-268	S6	DMat(S)
05.05.2021.	svi	9-11 h	2	O-030	P13	DM(P)
05.05.2021.	svi	12-13h	1	O-030	S7	DMat(S)
06.05.2021.	svi	9-11 h	2	O-030	P14	DM(P)
07.05.2021.	svi	9-11 h	2	O-030	P15	DM(P)
07.05.2021.	svi	12-13 h	1	O-030	S8	DMat(S)
10.05.2021.	svi	9-11 h	2	O-030	P16	DM(P)
11.05.2021.	svi	9-11 h	2	O-030	P17	DM(P)
11.05.2021.	svi	12-13 h	1	O-030	S9	DMat(S)



12.05.2021.	svi	9-12 h	3	O-030	P18	DM(P)
12.05.2021.	svi	12-13 h	1	O-030	S10	DMat(S)
13.05.2021.	svi	9-12 h	3	O-030	P19	DM(P)
13.05.2021.	svi	12-13 h	1	O-030	S11	DMat(S)
14.05.2021.	svi	9-12 h	3	O-030	Završni ispit	Dean Marković

Dodatne informacije:

Nastavni plan je podložan izmjenama u ovisnosti o razvoju situacije s COVID-19 krizom.

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*.