

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

Akadska godina: 2026./2027.

Studij: Medicinska kemija

Kod kolegija: MK102

ECTS bodovi: 6

Jezik na kojem se izvodi kolegij: Hrvatski/engleski

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

Prof. dr.sc. Dean Marković 40h Predavanja i 11h Seminari

Nositelj kolegija i kontakt podaci:

Titula i ime: Prof. dr.sc. Dean Marković

Adresa: O-210

tel: 584-816

e-mail: dean.markovic@uniri.hr

Titula i ime Doc. dr.sc. Nikolina Vidović

Adresa: O-804

e-mail: nikolina.vidovic@biotech.uniri.hr

Vrijeme konzultacija: prema dogovoru

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:*

- 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. Završni ispit

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. Položiti ispit.

Ispitni rokovi:

1. ispitni rok održat će se (definirati datum, mjesto i vrijeme). 21.05. online ili O-268, 11.00-14.00h
2. ispitni rok održat će se (definirati datum, mjesto i vrijeme) prema dogovoru sa studentima u terminu ne kasnije od 15 dana od 1. ispitnog roka
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):

Tijekom kontinuirane nastave studenti mogu ostvariti najviše **20 % ukupnog broja ocjenskih bodova**, dok se preostalih **80 %** bodova raspodjeljuje na **kolokvij** i **završni ispit**, pri čemu svaki nosi **40 % udjela u završnoj ocjeni**.

Kolokvij se uvijek provodi **u pisanom obliku**, dok završni ispit može biti:

- **pismeni,**
- **usmeni, ili**
- **kombinacija pismenog i usmenog ispita,**

Studenti koji su tijekom kontinuiranog dijela nastave ostvarili:

- od 0 do 9,9% ocjenskih bodova ne mogu pristupiti završnom ispitu
- više od 10% 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 kolokviju i završnom ispitu, a prolazne ocjene su izvrstan (5), vrlo dobar (4), dobar (3) i dovoljan (2).

Raspored nastave:

Datum	Grupa	Vrijeme	Br. h nastave	Mjesto	Oblik nastave	Izvođač
26.04.2027.	svi	9-11 (P)	2	O-268	P1	DM (P)
27.04.2027.	svi	9-12 h	3	O-268	P1+P2	DM(P)
28.04.2027.	svi	9-12 h	3	O-268	P3	DM(P)
29.04.2027.	svi	12-15 h	3	O-268	P4+S1	DM (P2 sata)+NV(S 1 sat)
30.04.2027.	svi	9-11 h	2	O-268	P4	DM(P)
03.05.2027.	svi	9-13 h	4	O-268	P5+S2	DM(2hP)+NV(2hS)
04.05.2027.	svi	9-12 h	3	O-268	P5	DM(P)
05.05.2027.	svi	9-13h	4	O-268	S3	DM (P 2 sata)+NV(S 2 sata)
06.05.2027.	svi	9-12h	3	O-268	P5	DM(P)
10.05.2027.	svi	9-12 h	3	O-268	P6	DM(P)
11.05.2027.	svi	9-12 h	3	O-268	P6	DM(2h P) +NV(S1 sat)
12.05.2027.	svi	9-12h	3	O-268	P5	DM(P)
13.05.2027.	svi	10-13 h	3	O-268	P6+S	DM(P 2 sata)+NV(S 1 sat)
14.05.2027.	svi	10-12 h	2	O-268	P7	DM(P)
17.05.2027.	svi	11-13 h	2	O-268	P8+P9	DM(P)
18.05.2027.	svi	11-15 h	4	O-268	P9+S5	DM(P 2 sata)+NV(S 2 sata)
19.05.2027.	svi	11-13 h	2	O-268	P11+P10	DM(P)

19.05.2026.	svi	14-17 h	3	O-268	Kolokvij	NV
20.05.2026.	svi	11-13 h	2	O-268	S	NV(S 2 sata)
21.05.2027.	svi	11-14 h	3	O-268	Završni ispit	NV

Dodatne informacije:

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

Akadska čistost

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