



Sveučilište u Rijeci
University of Rijeka



Detaljni izvedbeni nastavni plan za kolegij:

Fizikalno-organska i računska kemija

Akadska godina: 2023/2024

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. Dean Marković 40h Predavanja i 11h Seminari

Nositelj kolegija i kontakt podaci:

Titula i ime: Prof. Dean Marković

Adresa: O-210

tel: 584-816

e-mail: dean.markovic@uniri.hr

Asistent:

Titula i ime Dr. Sc. Nikolina Vidović

Adresa: O-147

e-mail: nikolina.vidovic@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. 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. 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-269, 12.00-15.00h
2. ispitni rok održat će se (definirati datum, mjesto i vrijeme). 24.05. online ili 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):

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 |
|-------------|-------|---------|-------------------|--------|---------------|--------------------------|
| 22.04.2024. | svi | 9-12 h | 2 | O-269 | P1+P2 | DM(P) |
| 24.04.2024. | svi | 9-12 h | 2 | O-269 | P3 | DM(P) |
| 25.04.2024. | svi | 9-12 h | 3 | O-269 | P4+S1 | DM (P2 sata)+NV(S 1 sat) |
| 26.04.2024. | svi | 8-10 h | 2 | O-269 | P4 | DM(P) |
| 29.04.2024. | svi | 9-12 h | 3 | O-269 | P5+S2 | DM(P)+NV(S) |
| 30.04.2024. | svi | 9-11 h | 2 | O-269 | P5 | DM(P) |
| 02.04.2024. | svi | 9-12 h | 3 | O-269 | S3 | DM(P 2 sata)+NV(S 1 sat) |
| 03.05.2024. | svi | 9-11 h | 2 | O-269 | P5 | DM(P) |
| 06.05.2024. | svi | 9-11 h | 2 | O-269 | P6 | DM(P)) |



| | | | | | | |
|-------------|-----|--------|---|-------|---------------|---------------------------|
| 07.05.2024. | svi | 9-12 h | 3 | O-269 | S4 | DM(P 2 sata)+NV(S 1 sat) |
| 08.05.2024. | svi | 9-11 h | 2 | O-268 | P7 | DM(P) |
| 09.05.2024. | svi | 9-11 h | 2 | O-269 | P8+P9 | DM(P) |
| 10.05.2024. | svi | 9-12 h | 3 | O-268 | S5 | DM(P 2 sata)+NV(S 1 sat) |
| 13.05.2024. | svi | 9-11 h | 2 | O-269 | P11+P10 | DM(P) |
| 14.05.2024. | svi | 9-12 h | 3 | O-269 | Kolokvij | NV |
| 15.05.2024. | svi | 9-11 h | 2 | O-269 | P12 | DM(P) |
| 16.05.2024. | svi | 9-13 h | 4 | O-269 | P13 S6+S7 | DM(P 2 sata)+NV(S 2 sata) |
| 17.05.2024. | svi | 9-11 h | 2 | O-269 | P15+P14 | DM(P) |
| 20.05.2024. | svi | 9-11h | 2 | O-269 | S8+S9 | NV(S) |
| 21.05.2024. | svi | 9-11 h | 2 | O-269 | P17+P16 | DM(P) |
| 22.05.2024. | svi | 9-11 h | 2 | O-269 | P19+P18 | DM(P) |
| 23.05.2024. | svi | 9-11 h | 2 | O-269 | S10+S11 | NV(S) |
| 24.05.2024. | svi | 9-11 h | 2 | O-269 | Završni ispit | NV |

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*.



Sveučilište u Rijeci
University of Rijeka

