

**SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
KEMIJSKI ODSJEK**

**PROGRAM POSLIJEDIPLOMSKOG SVEUČILIŠNOG
(DOKTORSKOG) STUDIJA KEMIJA**

akad. god. 2015./2016.

Zagreb, 2015.

Smjer: ANORGANSKA I STRUKTURNA KEMIJA (ASK)

101: KINETIKA I REAKCIJSKI MEHANIZMI KOMPLEKSA PRIJELAZNIH METALA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Marina Cindrić, redovita profesorica, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Određivanje zakona brzine. Reakcijska brzina i zakon brzine. Integrirani zakon brzine. Monofazne jednosmjerne i povratne reakcije. Polifazne jednosmjerne reakcije. Relaksacijska i kinetika izmjene. Izvođenje mehanizama. Zakon brzine, i njegova provjera. Aktivacijski parametri, termodinamičke funkcije i mehanizam. Linearna ovisnost slobodnih energija. Veza između aktivacijske entalpije i entropije te aktivacijskog volumena s mehanizmom. Učinak medija na mehanizam.

Ekperimentalno određivanje reakcijske brzine. Tekućinski i relaksacijski postupci. Veliki poremećaji. Kompeticijski postupci. Dostupne konstante brzine iz brzih reakcija. Spektrofotometrija i drugi fizikalno-kemijski postupci praćenja napredovanja reakcije. Uzorkovanje. Istraživanje međuprodukta.

Supstitucijske reakcije. Supstitucija u oktaedarskih kompleksa. Ubrzana supstitucija monodentatnih liganada. Reakcije zamjene polidentatnih liganada i makrocikla. Supstitucija u kvadratnih kompleksa. Supstitucija u tetraedarskim kompleksima. Supstitucija u pentakoordiniranim kompleksima. Supstitucija u ustrojenim surfaktantnih sustavima. Supstitucija u metaloproteinima.

Oksidacijsko-redukcijske reakcije. Reakcije u vanjskoj ljusci. Redoks reakcije u unutarnjoj ljusci. Uloga premošćujućeg liganda u redoks reakcijama u unutarnjoj ljusci. Intramolekularni prijenos elektrona. Prijenos elektrona u proteinima.

Promjena ligandne reaktivnosti nakon stvaranja kompleksa. Metal kao središte okupljanja reaktanata. Poticanje reakcije u vezanom ligandu. Hidroliza i kiselost koordiniranih liganada. Elektrofilne supstitucije. Učinci zaštićenja. Poremećaj reakcijske stehiometrije. Promjena molekularnih naprezanja. Uloga liganda. Izomerija i stereokemijska promjena. Konformacijska i konfiguracijska izomerija. Spinska ravnoteža u oktaedarskim kompleksima. Vezna, geometrijska i optička izomerija. Oktaedarski, tetra-, penta-, hepta- i oktakoordinirani kompleksi. Inverzija i izmjena protona na asimetričnom dušiku.

Anorganska fotokemija. Kinetički čimbenici i kvantni prinos. Fotokemija kompleksa Co^{III} , Rh^{III} i Cr^{III} . Polipiperidinski kompleksi Ru^{II} . Organometalna fotokemija. Fotokemijski reakcijski intermedijeri.

Organometalne supstitucijske reakcije. Vezanje liganda. Supstitucijske reakcije metalnih karbonila. Disocijacija drugih liganada. Učinak liganda. Specije sa 17 elektrona. Supstitucije na polinuklearnim metalnim karbonimima. Reakcije supstitucije liganda na alkilnim kompleksima. Hidridni, nitrozilni, alilni i drugi kompleksi.

Homogena kataliza s kompleksima prijelaznih metala. Homogena hidrogenacija alkena. Asimetrična hidrogenacija. Hidroformilacijska reakcija. Wackerova acetaldehidna sinteza. Hidrocijanacija 1,3-butadiena. Olefinska metateza. Polimerizacija alkena. Metanolna karbonilacija.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Upoznavanje s temeljnim mehanizmima reakcija u anorganskoj kemiji.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, konsultacije i seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

1. R. G. Wilkins, Kinetics and Mechanism of Reactions of Transition Metal Complexes, VCH, Weinheim, 1991.
2. M. L. Tobe, J. Burgess, Inorganic Reaction Mechanisms, Longman, Harlow, 1999.
3. J. D. Atwood, Inorganic and Organic Reaction Mechanisms, Wiley-VCH, Inc., New York 1997.
4. R. B. Jordan, Reaction Mechanisms of Inorganic and Organometallic Systems, Oxford University Press, Inc., Oxford, 2007.

DOPUNSKA LITERATURA

1. J. H. Espenson, Chemical Kinetics and Reaction Mechanisms, McGraw-Hill Companies, Inc., Custom Publishing, New York, 2002.
2. S. Ašperger, Kemijska kinetika i anorganski reakcijski mehanizmi, HAZU, Zagreb, 1999. (Postoji prijevod izvornika na engleskom iz 2003.)
3. F. Basolo, R. G. Pearson, Mechanisms of inorganic reactions. A study of metal complexes in solution,

Wiley Eastern Private Ltd., 2nd Ed., 1973.

4. D. Katakis, G. Gordon, Mechanisms of Inorganic Reactions, Wiley-Interscience, New York, 1987.

5. J. P. Candlin, K. A. Taylor, D. T. Thompson, Reaction of transition metal complexes, Elsevier Publishing Company, 1968 (Postoji prijevod izvornika na ruskom iz 1970.)

6. E. C. Constable, Metals and Ligand Reactivity, 2. izd., VCH, Weinheim, 1996.

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

102: SINTEZA, IDENTIFIKACIJA I PRIMJENA ANORGANSKIH SPOJEVA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Marina Cindrić, redovita profesorica, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu; dr. sc. Višnja Vrdoljak, izvanredna profesorica Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Pregled osnovnih preparativnih metoda kao što su reakcije adicije i supstitucije, oksido-redukcijske reakcije, reakcije termičke disocijacije, u inertnoj atmosferi, reakcije supstitucije liganada (trans efekt). Primjena modernih tehnika u pripravi anorganskih spojeva (s posebnim naglaskom na sintezu kompleksnih spojeva i polioksometalata), a koje obuhvaćaju: reakcije u čvrstom stanju, u otopini (vodeni i nevodeni medij), hidrotermalnu sintezu, elektrolitičku oksidaciju i dr. Izolacija anorganskih spojeva: primjena ionske izmjene, tankoslojne kromatografije i kromatografije na koloni, vakuum sublimacije, ekstrakcije i elektrolitičke kristalizacije. Metode karakterizacije: klasične analitičke metode i instrumentalne metode (IR, Raman, UV, NMR, EPR, magnetokemijska mjerenja, difrakcija, određivanje konstanti stabilnosti dr.). Primjena anorganskih spojeva: kompleksni spojevi kao biološki i industrijski katalizatori; klusteri i polioksometalati u reakcijama katalize.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Upoznavanje s metodama sinteze i identifikacije u anorganskoj preparativnoj kemiji s posebnim naglaskom na važnost primjene anorganskih spojeva kao katalizatora.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, konsultacije, seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

1. S. F. A. Kettle, Physical Inorganic Chemistry, Oxford University Press, Oxford, 1998.
2. G. S. Girolami, T. B. Rauchfuss, R. J. Angelici, Synthesis and Technique in Inorganic Chemistry, University Science Books, Sausalito, 1999.
3. G. Wilkinson, R. D. Gillard, J. A. McCleverty, Comprehensive Coordination Chemistry, Pergamon: New York 1987.
4. M.T. Pope, A. Müller, Polyoxmetalates: From Platonic Solids to Anti-Retroviral Activity, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht 1994.
5. S. B. C. Gates, L. Guzzi, H. Knözinger, Metal clusters in catalysis, Elsevier, Amsterdam, 1986.

DOPUNSKA LITERATURA: revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 8

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

103: KRISTALOGRAFIJA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Vladimir Bermanec, akademik, redoviti profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu; dr. sc. Marija Luić, naslovna redovita profesorica, znanstvena savjetnica, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Osnovne značajke kristalnog stanja. Kongruentnost i enantiomorfnost. Elementi simetrije: centar inverzije, osi simetrije (rotacijske, rotoinverzne, rotorefleksne, vijčane), ravnine simetrije (klizne ravnine). Kristalne rešetke – primitivne i centrirane. Racionalna svojstva rešetaka, kristalografski smjerovi i ravnine (Millerovi indeksi). Ograničenja simetrije zbog periodičnosti rešetke i obrnuto. Grupe točke. Neumannov princip. Laueove klase. Kristalni sustavi. Bravaisove rešetke (dvo – i trodimenzijske). Prostorne grupe (izvod i opis nekih od njih prema Internacionalnim tablicama za kristalografiju). Morfologija kristala – kristalne forme. Matrična reprezentacija simetrijskih operatora. Kristalna optika. Zakon refleksije i zakon loma. Indeks loma i njegovo određivanje. Dvolom. Optički jednolomne (izotropne) i optički dvolomne (anizotropne) tvari. Optička indikatrixa. Optički jednoosni i dvoosni kristali. Polarizacijski mikroskop.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Temeljna znanja iz kristalografije neophodna za istraživački rad

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, konsultacije, seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

1. C. Giacovazzo: Fundamentals of Crystallography, Oxford University Press, Oxford 1992.
2. Lj. Barić: Mikrofiziografija petrogenih minerala, Školska knjiga, Zagreb 1967.
3. J. P. Glusker, M. Lewis, M. Rossi: Crystal Structure Analysis for Chemists and Biologists, Verlag Chemie, Weinheim 1994.
4. P. Luger: Modern X-Ray Analysis on Single Crystals, Walter de Gruyter, Berlin 1980.
5. W. J. Buerger: Elementary Crystallography, 3. izd., Wiley, New York 1965.
6. R.E. Stoiber, S.A. Morse: Crystal Identification with Polarizing Microscope, Chapman and Hall, New York 1994.
7. W.D. Nesse: Introduction to Optical Mineralogy, Oxford University Press, Oxford 1991.

DOPUNSKA LITERATURA: revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

104: RENTGENSKA STRUKTURNA ANALIZA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Dubravka Matković-Čalogović, redovita profesorica, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu; dr. sc. Ivica Đilović, docent, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Difrakcijski intenziteti i korištenje novih izvora zračenja; simetrija difrakcijske slike i određivanje prostorne grupe; račun strukturnih amplituda – korekcije mjerenih intenziteta: pogreške mjerenja, polarizacijski i Lorentzov faktor, temperaturni faktor, korekcija intenziteta uslijed nestabilnosti uzorka, apsorpcija; Fourierove transformacije u kristalografiji: teorija, algoritmi i primjena; strukturni faktor i strukturna amplituda; intenziteti i njihove funkcije raspodjele za centrosimetrične i necentrosimetrične kristale; Wilsonova statistika – računanje zajedničkog temperaturnog faktora i faktora skale; jedinični i normirani strukturni faktori; recipročni prostor u strukturnoj analizi; postupci za određivanje faze strukturnog faktora – direktne metode temeljene na algebarskim metodama i teoriji vjerojatnosti; vektorske metode za određivanje faza strukturnih faktora – Pattersonova funkcija te Harkerove linije i ravnine; izomorfna zamjena – jednostruka (SIR) i višestruka (MIR), Rossmannova metoda, translacijske i rotacijske funkcije; anomalno raspršenje – komplementarni pristup u određivanju faza strukturnih faktora i određivanje apsolutne konfiguracije i konformacije molekula; Fourierova sinteza, mape elektronske gustoće i određivanje strukture molekule; metode uočnjavanja strukture: postupak najmanjih kvadrata – korištenje stereokemijskih ograničenja i molekulske dinamike; Fourierova analiza – modificirane mape elektronske gustoće: uporaba kvadratnih funkcija, druge nelinearne funkcije usmjerene k poboljšanju razlučivanja mapa elektronske gustoće (ublažavanje efekta otapala, postupak usrednjavanja pri pojavi nekristalografske simetrije); numerički i grafički postupci za prikaz molekulske i kristalne strukture spoja – račun molekulske geometrije, vrednovanje strukture i interpretacija, kristalografske datoteke, trodimenzijski prikaz građe molekula i njihovo slaganje u kristalu; računalna grafika.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Temeljna znanja iz roentgenske strukturne analize neophodna za istraživački rad

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, konsultacije, seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

M. F. C. Ladd, R. A. Palmer: Structure Determination by X-Ray Crystallography, Plenum Press, New York 1977.

1. C. Giacovazzo: Fundamentals of Crystallography, Oxford University Press, Oxford 1992.
2. G. M. Sheldrick, C. Kruger, R. Godard (ur.): Crystallographic Computing 3: Data Collection, Structure Determination, Proteins and Databases, Clarendon Press, Oxford 1985.
3. U. Shmueli (ur.): International Tables for Crystallography, vol. B, International Union of Crystallography, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht 1993.
4. A. C. J. Wilson (ur.): International Tables for Crystallography, vol. C, International Union of Crystallography, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht 1995.
5. J. Drenth: Principles of Protein Crystallography, Springer, Heidelberg 1994.
6. D. E. McRee: Practical Protein Crystallography, Academic Press, London 1993.
7. T. L. Blundell, L. N. Johnson: Protein Crystallography, Academic Press, London 1976.
8. C. Giacovazzo: Direct Methods in Crystallography, Academic Press, New York 1980.
9. M. F. C. Ladd, R. A. Palmer: Theory and Practice of Direct Methods in Crystallography, Plenum Press, New York 1980.
10. D. Blow: Outline of Crystallography for Biologist, Oxford University Press, Oxford 2002.
11. A. McPherson: Introduction to Macromolecular Crystallography, Wiley-Liss, Hoboken, New Jersey 2003.
12. A.M. Lesk: Introduction to protein architecture, Oxford University Press, Oxford 2001.
13. P.E. Bourne, H. Weissig, Edt. Structural Bioinformatics, Wiley-Liss, New York 2003.

DOPUNSKA LITERATURA: revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI : 8

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

105: KEMIJA ČVRSTOG STANJA BIOLOŠKI AKTIVNIH TVARI

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Ernest Meštrović, znanstveni savjetnik, naslovni redoviti profesor, Pliva d.d.

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Uvod u kemiju čvrstog stanja biološki aktivnih tvari. Metode kristalizacije čvrstog stanja. Kristalni rast i habitus kristala, odnos kristalne/molekulske strukture i habitusa. Polimorfne pseudopolimorfne (hidrati i solvati), amorfne forme. Vodikove veze i ostale nekovalentne interakcije. Upotreba nekovalentnih interakcija u kreiranju novih materijala. Metode analize čvrstog stanja. Fizičke i kemijske transformacije. Fazni dijagrami višekomponentnih sustava. Interakcije u višefaznim sustavima. Kompatibilnost i inkompatibilnost tvari sadržanih u smjesama. Metode pretraživanja i intelektualno vlasništvo.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Temeljna znanja kemije čvrstog stanja biološki aktivnih tvari neophodna za istraživački rad

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, konsultacije, seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

1. Stephen R. Byrn, Ralph R. Pfeiffer, and Joseph G. Stowell, Solid-State Chemistry of Drugs SSCI inc, West Lafayette 2001.
2. Harry G. Brittain (Ed.), Physical Characterization of Pharmaceutical Solids New York Marcel Dekker, Inc., 1995.
3. S. Myerson, D. A. Green and P. Meenan, Crystal Growth of Organic Materials, American Chemical Society, Washington 1995.
4. M. Dekker, Polymorphism in Pharmaceutical Solids, Dekker, Inc., New York 1999.
5. R. G. Desiraju The crystal as a Supramolecular Entity, Wiley, Chichester 1996.
6. J. Bernstein Polymorphism in Molecular Crystals, Oxford University Press 2002.

DOPUNSKA LITERATURA: revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 8

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

106: DIFRAKCIJA U POLIKRISTALNOM MATERIJALU

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Stanko Popović, profesor emeritus, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu; dr. sc. Ivan Halasz, viši znanstveni suradnik, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Raspršenje roentgenskih zraka na slobodnom elektronu. Polarizacija. Raspršenje na nekoliko elektrona. Raspršenje na atomu. Kristalna i recipročna rešetka. Difrakcija u malom kristalu. Laueove jednačbe. Strukturni faktor za Braggov ogibni maksimum. Utjecaj temperaturnog titranja na difrakcijsku sliku. Integrirani intenzitet za mali kristal i za kristalni prah – polikristal. Difrakcija u kristalnom prahu. Snimanje difrakcijskih slika i prikupljanje difrakcijskih podataka. Uređaji za visoku i nisku temperaturu, visoki tlak i kontroliranu atmosferu. Novi trendovi u razvoju difrakcijskih uređaja. Sinkrotronsko zračenje. Difrakcija elektrona i neutrona u kristalnom prahu. Interpretacija difrakcijske slike kristalnog praha. Analiza slučajnih i sustavnih pogrešaka pri mjerenju položaja difrakcijskih maksimuma. Identifikacija kristalnog materijala, kvantitativna fazna analiza. Točno mjerenje bridova i kutova jedinične ćelije. Proučavanje reda-nereda u kristalnoj rešetki. Difrakcija u defektnom kristalu. Proširenje difrakcijskih maksimuma. Izvođenje čistog difrakcijskog profila. Izbor funkcija za opisivanje profila difrakcijskih maksimuma. Veličina kristalnih domena-kristalita i deformacija kristalne rešetke. Pogreške u slijedu mrežnih ravnina. Istraživanje čvrstih otopina, faznih pretvorbi i definiranje faznih dijagrama. Nove metode indiciranja difrakcijskih slika polikristala i određivanje kristalne strukture. Izvorna metoda prilagodbe cijele difrakcijske slike po Rietveldu, te njen daljnji razvoj. Istovremeno utočnjavanje bridova i kutova jedinične ćelije, zaposjednutosti atomnih položaja, izotropnog i anizotropnog temperaturnog faktora. Raspršenje rentgenskih zraka u amorfnom materijalu. Funkcija radijalne raspodjele atoma. Istraživanje metalnih stakala.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA:

Temeljna znanja o difrakciji roentgenskih zraka na polikristalnim uzorcima neophodna za istraživački rad

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, konsultacije, seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

1. C. Giacovazzo et al.: Fundamentals of Crystallography, 2nd Ed., Oxford University Press, Oxford, 2002. (IUCr Texts on Crystallography 7).
2. W. I. F. David et al.: Structure determination from Powder Diffraction Data, Oxford University Press, Oxford, 2002 (IUCr Texts on Crystallography 13).
3. R. L. Snyder et al.: Defect and Microstructure Analysis by Diffraction, Oxford University Press, Oxford, 2000 (IUCr Texts on Crystallography 10).
4. R. A. Young (ed.): The Rietveld Method, Oxford University Press, Oxford, 1993 (IUCr Monograph on Crystallography 5).
5. H.-J. Güntherodt, H. Beck (eds.): Glassy Metals I, Springer-Verlag, Berlin, 1981.
6. H. P. Klug, L. E. Alexander : X-Ray Diffraction Procedures, 2nd Ed., John Wiley, New York, 1974.
8. B. E. Warren: X-Ray Diffraction, Addison-Wesley, Reading , 1969.

DOPUNSKA LITERATURA: revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 8

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

151: EKSPERIMENTALNE METODE U KRISTALNOJ STRUKTURNOJ ANALIZI

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Biserka Gržeta, znanstvena savjetnica, Institut Ruđer Bošković, Zagreb; dr. sc. Ante Nagl, redoviti profesor u mirovini, Tekstilno-tehnološki fakultet, Sveučilište u Zagrebu; dr. sc. Biserka Prugovečki, izvanredna profesorica, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Izvori zračenja; klasični izvori rentgenskog zračenja, sinkrotron. Efekti prolaska rentgenskih zraka kroz čvrstu tvar; difrakcija, apsorpcija, fluorescencija, Comptonov efekt - primjena. Difrakcija neutrona, difrakcija elektrona. Usporedba s difrakcijom rentgenskih zraka. Rentgenski uređaji za strukturno istraživanje. Geometrija, konstrukcija i rukovanje klasičnim i modernim rentgenskim uređajima za strukturno istraživanje. Detekcija i registracija rentgenskih zraka. Filmske metode; tipovi kamera, metode rotirajućeg i oscilirajućeg kristalnog uzorka, indiciranje refleksa i mjerenje njihovih intenziteta. Brojila i detektori: poluvodički detektori, detektori "imaging plate". Analiza, interpretacija i obradba eksperimentalnih podataka difrakcije rentgenskih zraka u jediničnom kristalu. Pouzdanost i točnost određivanja jedinične ćelije, gustoće, simetrije i strukture. Kristalizacija: tehnike i metode. Kriteriji za odabir uzoraka. Rad s nestabilnim tvarima. Metode usklađivanja difrakcijskih slika polikristalnih uzoraka pri određivanju kristalne strukture; metoda usklađivanja pojedinačnih difrakcijskih linija, metoda dekompozicije cijele difrakcijske slike, Rietveldova metoda. Strukturna analiza amorfnih tvari: raspršenje rentgenskih zraka u amorfnoj tvari, metoda EDXD, metoda EXAFS. Zaštita pri radu s rentgenskim uređajima. Dozimetrija.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: specifična znanja eksperimentalnih metoda u strukturnoj analizi s posebnim naglaskom na polikristalne uzorke neophodna za istraživački rad

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, konsultacije, seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

1. H. P. Klug, L. E. Alexander: X-Ray Diffraction Procedures, 2. izd, Wiley, New York 1974.
2. G. N. Greaves, I. H. Munro (ur.): Synchrotron Radiation Sources and their Applications, Edinburgh University Press, Edinburgh 1989.
3. B. D. Cullity: Elements of X-Ray Diffraction, 2. izd., Addison-Wesley, Reading 1978.
4. N. F. M. Henry, H. Lipson, W. A. Wooster: The Interpretation of X-Ray Diffraction Photographs, 2. izd, Macmillan, Co., London 1960.
5. L. V. Azaroff: Elements of X-Ray Crystallography, McGraw-Hill Book Co., New York 1968.
6. G. H. Staot, L. H. Jensen: X-Ray Structure Determination, Macmillan, London 1958.
7. U. W. Arndt, B. T. M. Willis: Single Crystal Diffractometry, Cambridge University Press, Cambridge 1966.
8. W. Kleber: Einführung in die Kristallographie, VEB Verlag Technik, Berlin 1977.
9. G. E. Bacon: Neutron Diffraction, 3. izd., Clarendon Press, Oxford 1975.
10. R. A. Young (ur.): The Rietveld Method, IUCR Monographs on Crystallography 5, Oxford University Press, Oxford 1993.
11. M. Thoms, H. Burzlaff, A. Kinne, J. Lange, H. Von Seggern, R. Spengler, A. Winnacker: An Improved X-Ray Image Plate Detector for Diffractometry, Proc. of the EPDIC IV, Trans. Tech. Publications, Aedermannsdorf 1996.
12. H.-J. Güntherodt, H. Beck (ur.): Glassy Metals I, Springer-Verlag, Berlin 1981.

DOPUNSKA LITERATURA: revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

152: ISTRAŽIVANJA I PRIMJENA ANORGANSKIH MATERIJALA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Andrea Moguš-Milanković, znanstvena savjetnica, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Keramika: Tehnike dobivanja, vrste keramike, svojstva i primjena. Dielektrici, piroelektrici, feroelektrici, električna svojstva, električna vodljivost, određivanje dielektričnih svojstava keramike, polarizacija dielektrika i feroelektrika, metode koje se koriste za istraživanje faznih promjena i električnih svojstava keramike. Elektro-optička svojstva keramika i njihova primjena. Dopiranje keramike, promjene strukture i svojstava. Poluvodiči: Kristalni i amorfni poluvodiči. Svojstva, elektronska vodljivost, fotovodljivost. Hidrogeniranje i dopiranje poluvodiča. Stvaranje defekata u strukturi i promjene svojstava. Primjena poluvodiča u elektronici i solarnoj tehnologiji. Stakla: Principi nastajanja stakla, nukleacija/kristalizacija stakala. Odnos sastava i strukture. Mikrostruktura stakla, separacija faza. Vrste stakala, tehnike dobivanja. Svojstva: optička, električna, dielektrična. Ovisnost električne vodljivosti o sastavu i temperaturi, elektronska i ionska vodljivost. Mehanička svojstva. Određivanje veličine kristalita u staklastoj matrici, promjene svojstava. Bioaktivna, radioaktivna stakla. Primjena stakala u elektronici, medicini, dijagnostici i nuklearnoj tehnologiji. Staklo-keramika: Tehnike dobivanja. Kristalizacija staklo-keramike. Svojstva, niska termička ekspanzija, transparentnost, mehanička napetost. Primjena u medicini i dentalnoj industriji. Kompoziti: Tehnike nastajanja. Staklo-polimer kompoziti. Ovisnost optičkih i mehaničkih svojstava o kompoziciji stakla te vrsti i koncentraciji polimera. Bioaktivni i biodegradibilni kompoziti. Primjena kompozita u stomatologiji i medicini.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: specifična znanja kemije anorganskih materija s težištem na kemiju stakla i keramike

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, konsultacije, seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

1. Y. Xu, *Ferroelectric Materials and Their Applications*, North-Holland, 1991.
2. A. K. Varshneya, *Fundamentals of Inorganic Glasses*, Academic Press, Inc. 1994.
3. N. F. Mott and E. A. Davis, *Electronic Processes in Non-crystalline Materials*, Clarendon Press, Oxford, 1979.
4. M. H. Brodsky, *Amorphous Semiconductors*, Springer-Verlag, Berlin, 1979.
5. R. C. Ropp, *Inorganic Polymeric Glasses*, Elsevier, 1992.
6. C. J. Brinker and G. W. Scherer, *The Physics and Chemistry of Sol-Gel Processing*, Acad. Press, Inc., 1990.
7. G. Fischman, A. Clare, L. Hench, *Bioceramics: Materials and Application*, 1995.

DOPUNSKA LITERATURA: revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

154: ELEKTRONSKA DIFRAKCIJA I MIKROSKOPIJA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Anđelka M. Tonejc, redovita profesorica u mirovini, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu; dr. sc. Igor Derđ, viši znanstveni suradnik, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Osnove elektronske mikroskopije. Moderne metode ispitivanja materijala u analitičkom elektronskom mikroskopu. Ispitivanje nanokristaliničnih materijala. Interpretacija transmisijskih elektronskih mikrografija i difrakcija polikristaliničnog, monokristaliničnog i amornog uzorka. Difrakcijski kontrast. Fazni kontrast. Z-kontrast. Slika visokog razlučivanja. Procesiranje slike visokog razlučivanja glede analize deformacije rešetke, dislokacija, pogreške u slijedu mrežnih ravnina, granica zrna, granica faza. Strukturno razlučivanje od 0.2 do 0.1 nm. Rasterski elektronski mikroskop. Kvalitativna i kvantitativna analiza sastava materijala raspršenjem rentgenskih zraka u analitičkom elektronskom mikroskopu. Elementarna slika ("X-ray mapping"). Vježbe: Indeksiranje slike elektronske difrakcije. Rad s programima za procesiranje slike visokog razlučivanja u svrhu određivanja strukture materijala. Određivanje veličine kristalita raznim elektronsko- mikroskopskim metodama.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: specifična znanja iz elektronske difrakcije i mikroskopije neophodna za istraživački rad

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, konsultacije, seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

1. D.B. Williams and C.B. Carter, Transmission Electron Microscopy, A Textbook for Materials Science, Plenum Press, New York, 1996.
2. P. R. Buseck, Reviews in Mineralogy, Vol. 27. ; Minerals and reactions at the atomic scale: Transmission Electron Microscopy, Mineralogical Society of America, 1992.
3. J.J. Goldstein, D.E. Newbury, P. Echlin, D.C. Joy, C. Fiori, E. Lifshin, Electron Microscopy and X-ray Microanalysis, Plenum Press, 3rd edition, New York / London, 2001.
4. M. Rühle and M. Wilkens, Electron Microscopy, in R.W. Cahn and P. Haasen, eds. Physical Metallurgy; fourth, revised edition, Elsevier Science BV, 1996.

DOPUNSKA LITERATURA: revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

155: KONFORMACIJSKA ANALIZA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Nenad Raos, znanstveni savjetnik, Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Pojam konformacije i konformacijske energije. Temelji molekulske mehanike. Barijere rotacije oko veza C-C, C-X i X-X (X = O, N, P, S, As, Sb) i oko veza metal_ligand. Konformacije ravnih i cikličkih molekula. Napetost anorganskih prstenova. Konformacije kelatnih prstenova (aminokiselinskog, diaminskog, salicilaldiminatnog i dr.). Distorzija koordinacijskog poliedra i molekulsko-mehaničke metode za njezin proračun. Proračun konformacijske energije u kristalu.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: specifična znanja konformacijske analize neophodna za istraživački rad

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, konsultacije, seminari.

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

1. N. Raos: Konformacijska analiza, Suvremena kemija, Školska knjiga, Zagreb 1988.
2. U. Burkert, N. L. Allinger: Molecular mechanics, ACS Monograph 177, Amer. Chem. Soc., Washington D.C. 1982.
3. N. Raos: Granice molekulske mehanike, Kem. Ind. 41 (1992) 119-124.
4. N. Pudovik (ur.): Konformacionnyj analiz elementoorganičeskikh soedinenij, Nauka, Moskva 1983.
5. M. Gimarc, D. S. Waren: Strain energies in inorganic rings, Croat. Chem. Acta 67 (1994) 125-141.
6. J. Sabolović, N. Raos: Molekulsko-mehanički modeli za proračun distorzije koordinacijskog poliedra, Kem. Ind. 40 (1991) 275-280.
7. G. R. Brubaker, D. W. Johnson: Molecular mechanics calculations in coordination chemistry, Coord. Chem. Rev. 53 (1984) 1.
8. P. Hay: Methods of molecular mechanics modeling of coordination compounds, Coord. Chem. Rev. 126 (1993) 177-236.
9. V. J. Burton, R.J. Deeth: Molecular modelling for copper(II) centres, J. Chem. Soc., Chem. Commun. (1995), 573.
10. V. J. Burton, R.J. Deeth, C. M. Kemp, P. J. Gilbert: Molecular mechanics for coordination complexes: the impact of adding d-electron stabilization energies, J. Amer. Chem. Soc. 117 (1995) 8407.

DOPUNSKA LITERATURA: revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

156: ODABRANA POGLAVLJA BIOANORGANSKE KEMIJE

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Dubravka Matković-Čalogović, redovita profesorica, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Uloga metalnih iona u biološkim sustavima. Metaloproteini. Analiza strukture i svojstava. Zamjena metalnih iona u inzulinu. Neke metode određivanja okoline i koordinacije metalnog iona: rentgenska difrakcijska analiza; rentgenska apsorpcijska spektroskopija (XAS, EXAFS). Baze podataka.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: specifična znanja o određivanju koordinacije metalnih iona u biološkim sustavima s posebnim naglasakom na roentgensku strukturnu analizu neophodna za istraživački rad

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, konsultacije, seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

1. Wolfgang Kaim & Brigitte Schwederski: Bioinorganic Chemistry: Inorganic Elements in the Chemistry of Life, Wiley, Chichester, 1995.
2. Lawrence Que, Jr.: Physical Methods in Bioinorganic Chemistry, University Sci. Books, Sausalito, California, 2000.

DOPUNSKA LITERATURA: revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

157: ODABRANA POGLAVLJA KRISTALNE STRUKTURNE ANALIZE

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Krešimir Molčanov, znanstveni suradnik, Institut Ruđer Bošković, Zagreb; doc. dr. sc. Vladimir Stilinović, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Interpretacija molekulskih i kristalnih struktura na temelju difrakcijskih podataka - točnost određivanja: analiza eksperimentalnih i sustavnih pogrešaka; utjecaj temperaturnog titranja atoma i prednost mjerenja pri niskim temperaturama; komparativne prednosti rentgenske, neutronske i elektronske difrakcije u određivanju molekularne strukture; kiralnost u kristalografiji i apsolutna konfiguracija, primjena standardnih kriterija u određivanju stereokemije, posebno konformacije molekula; važnost Ramachandranovih prikaza u konformaciji peptida i proteina; slaganje molekula u kristalu - analiza međumolekulskih sila-nekovalentnih interakcija koje određuju pakovanje, supramolekularno udruživanje i nano materijale: vodikove veze, C-H...pi, pi...pi interakcije, van der Waalsove i Coulombske sile; povezanost molekularne i kristalne strukture s kemijskim, fizikalnim i biološkim svojstvima; molekularno modeliranje - cilj i metode; korištenje datoteka - pristup i kritičnost pri odabiru informacija, analiza podataka, interpretacija i usporedba s rezultatima postignutim metodama računske kemije.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: specifična znanja neophodna za istraživački rad iz područja strukturne kemije

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, konsultacije, seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA.

1. B. Domenicano, I. Hargittai (ur.): Accurate Molecular Structures, Their Determination and Importance, International Union of Crystallography, Oxford University Press, Oxford 1992.
2. H. - B. Bürgi, J. D. Dunitz (ur.): Structure Correlation, vol. 1&2, VCH, Weinheim 1994.
4. A. T. Nall, K. A. Dill (ur.): Conformations and Forces in Protein Folding, American Association for the Advancement of Science, Washington D. C. 1991.
5. A. M. Lesk: Protein Architecture, Oxford University Press, Oxford 1991.
6. T. E. Creighton: Proteins, Structures and Molecular Properties, Freeman, New York 1993.
7. U. Shmueli (ur.): International Tables for Crystallography, vol. B, Kluwer Academic Press, Dordrecht 1993.
8. L. Dorset: Structural Electron Crystallography, Plenum Press, New York 1995.
9. L. Dorset: Electron Crystallography, Acta Crystallogr. B52 (1996) 753 - 769.
10. G. E. Bacon: Neutron Diffraction, 3. izd., Clarendon Press, Oxford 1975.

DOPUNSKA LITERATURA: revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

158: TEORIJA GRUPA U KRISTALOGRAFIJI**AUTOR(I) PROGRAMA:** dr. sc. Zoran Štefanić, znanstveni suradnik, Institut Ruđer Bošković, Zagreb**OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:**

Uvod u matricnu algebru: operacije na matricama, determinante, inverzija i svojstvene vrijednosti matrice; linearne transformacije, rotacije; skalarni i vektorski produkt. Osnove teorije grupa: aksiomi grupe, generatori, podgrupe; dekompozicija grupa, direktni produkt grupa; ireducibilne reprezentacije, tablice karaktera grupa; primjeri grupa simetrija. Grupe u kristalografiji: točkaste grupe, ravninske grupe, prostorne grupe; primjeri najčešćih prostornih grupa i simetrijskih operacija pomoću teorije grupa. Matricni račun u kristalografskim transformacijama: primjena matricne algebre u transformacijama kristalnih sustava; sačuvanje desnog kristalnog sustava prilikom transformacija; standardni i nestandardni *setting* pojedinih prostornih grupa, konvencije i njihove transformacije. Simetrija i fizikalna svojstva kristala: tenzori drugog reda; elastična svojstva kristala, piezoelektricitet; upotreba teorije grupa u vezi s fizikalnim svojstvima kristala; brillouinove zone, valni vektori, termička svojstva kristala. Termalne vibracije kristalne rešetke: vibracije kristalne rešetke; vibracije molekula, normalni modovi vibracije; atomski temperaturni faktori; prikaz anizotropnih vibracija termalnim elipsoidima (ORTEP); simetrijska ograničenja na temperaturne faktore. T,L,S matrice; korekcija duljine veze zbog termičkog gibanja; Hirshfeldov model.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Cilj kolegija je upoznavanje s teorijom grupa potrebnom u kristalografiji prilikom prikaza simetrijskih operacija, transformacija kristalnih sustava, opisivanja temperaturnog gibanja atoma i kristalne rešetke.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, konzultacije, seminari, on-line sustav predavanja

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

1. C. Giacovazzo ed., *Fundamentals of Crystallography*, Oxford University Press, 1992.
2. Edward Prince, *Mathematical Techniques in Crystallography and Material Science*, Springer-Verlag, 1982.
3. Ivan Bernal, Walter C. Hamilton, John S. Ricci, *Symmetry-A Stereoscopic Guide for Chemists*, W.H. Freeman & Company, San Francisco, 1972.
4. B.T.M. Willis, A.W. Pryor, *Thermal Vibrations in Crystallography*, Cambridge University Press, 1975.
5. Theo Hahn, Hans Wondratschek, *Symmetry of Crystals – Introduction to International Tables for Crystallography Vol. A*, Heron Press Ltd. Sofia, Bulgaria, 1994.
6. W.A. Wooster, *Tensors and group theory for the physical properties of crystals*, Clarendon Press, Oxford, 1973.
7. *International Tables for Crystallography*, Volume A, Edited by Theo Hahn, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Holland, 1983.
8. Hirshfeld, F.L. *Can X-ray data distinguish bonding effects from vibrational smearing?* *Acta Crystallographica*, A32, 1976, 239-244.
9. F. H. Herbstein and R. E. Marsh, *More Space-Group Corrections: From Triclinic to Centred Monoclinic and to Rhombohedral; Also From P1 to P-1 and From Cc to C2/c*, *Acta Cryst.* (1998). B54, 677-686.

DOPUNSKA LITERATURA: revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

181: ODABRANA POGLAVLJA ANORGANSKE I STRUKTURNE KEMIJE

AUTOR(I) PROGRAMA: Gostujući nastavnik

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA: ovisno o programu kolegija

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: specifična znanja iz anorganske kemije

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: ovisno o programu kolegija

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA: ovisno o programu kolegija

DOPUNSKA LITERATURA: revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

Smjer: ORGANSKA KEMIJA (OK)

201: ORGANSKA STEREOKEMIJA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Mladen Žinić, znanstveni savjetnik, naslovni redoviti profesor u mirovini, Institut Ruđer Bošković, Zagreb; dr. sc. Leo Frkanec, viši znanstveni suradnik, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA

Povijesni uvod. Vrste izomerije u organskoj kemiji. Stereoizomeri. Konstitucija, konfiguracija, konformacija. Molekulski modeli. Simetrija molekula. Elementi simetrije, simetrijske operacije i simetrijske grupe. Tipovi kiralnosti: centar, os i ravnina kiralnosti. Cahn-Ingold-Prelogov sustav označivanja konfiguracije kiralnih spojeva. Eksperimentalno određivanje konfiguracije stereoizomera. Apsolutna i relativna konfiguracija. Kiro-optičke metode: optička rotacijska disperzija i cirkularni dikroizam. Oktantno pravilo. Određivanje konfiguracije stereoizomera metodama nuklearne magnetske rezonancije: anizotropni efekti, konstante sprege, lantanoidi kao pojačivači pomaka, NOE efekti. Intramolekulska simetrija: homotopne i heterotopne skupine, enantiotopne i diastereotopne skupine i strane. Cikloenantiomernost i ciklodijastereozimerija. Kiralnost supramolekulskih sustava.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Sticanje temeljnih znanja iz područja stereokemije organskih molekula.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, seminari i konsultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- E. L. Eliel, S. H. Wilen: Stereochemistry of Organic Compounds, Wiley-Interscience, New York 1994.
- IUPAC Rules for the Nomenclature of Organic Chemistry. Section E: Stereochemistry, (Recommendations 1996), Pure Appl. Chem. 68 (1996) 2193.

DOPUNSKA LITERATURA

- J.-M. Lehn: Supramolecular Chemistry, Verlag Chemie, Weinheim 1995.
- A. S. Buda, T. Auf der Heyde, K. Mislow, Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 31 (1992) 989.
- U. De Rossi, S. Dahne, S.C. J. Meskers, H. P. J. M. Dekkers, ibid. 35 (1996) 760.
- R. E. Gawley, J. Aube: Principles of Asymmetric Synthesis, Tetrahedron Organic Chem. Ser. 14 (1996).

ECTS BODOVI 8

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno i usmeno

202: STEREOSELEKTIVNA SINTEZA I KATALIZA U ORGANSKOJ KEMIJI

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Srđanka Tomić-Pisarović, redovita profesorica, dr. sc. Ines Primožič, izvanredna profesorica, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA

Uvodno će se razmatrati svi osnovni pojmovi sa područja stereokemije neophodni za razumijevanje stereoselektivnih transformacija u organskoj kemiji, kao npr. osnove konformacijske analize i dinamičke stereokemije, osnove suvremene stereokemijske nomenklature (kiralnost, prokiralnost, enantiotopija, diastereotopija), elementi simetrije prisutni u akiralnim, prokiralnim i kiralnim molekulama, enantioselektivne vs. diastereoselektivne reakcije, te osnove njihove kinetičke i termodinamičke kontrole. Diastereoselektivne reakcije biti će analizirane na primjerima totalnih sinteza iz molekula koje pripadaju prirodnom "kiralnom spremniku" (engl. chiral pool), kao što su monosaharidi i amino kiseline u pripravi biotina, feromona, i nekih drugih biološki i komercijalno značajnih spojeva, te priprava ⇌-amino kiselina diastereoselektivnim hidrogeniranjem dvostrukih veza ugljik-ugljik i ugljik-dušik. Enantioselektivne transformacije biti će ilustrirane upotrebom kiralnih pomoćnih reagensa za generaciju kiralnih karbaniona, na pr. Meyersova metoda, te različitim stereoselektivnim adicijama na dvostruku vezu ugljik-ugljik i ugljik-kisik. Stereoselektivna kataliza predstavlja danas jedno od najintenzivnije istraživanih područja sintetske organske kemije, budući da omogućava "kiralno ekonomičnu" pripravu optički aktivnih spojeva u enantiomerno čistom obliku (EPC-enantiomerically pure compounds). Biti će posebno razmatrana *homogena stereoselektivna kataliza*, koja je dovela do intenzivnog razvoja kiralnih metalo-organskih katalitičkih kompleksa, uglavnom sa prelaznim metalima, i njihove primjene u enantioselektivnim transformacijama. Detaljnije će biti analizirani primjeri enantioselektivnih hidrogeniranja, transfera vodika i ciklopropanacija. Pokazna vježba: U okviru kolegija biti će u laboratoriju CATBIO Instituta "Ruđer Bošković" organizirana demonstracija jedne enantioselektivne katalitičke reakcije i separacije enantiomera upotrebom HPLC kolona s kiralnom stacionarnom fazom.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Sticanje temeljnih znanja iz područja stereoselektivne sinteze organskih spojeva te uporabe homogenih stereoselektivnih katalizatora u organskoj sintezi.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, seminari i konsultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- M. Nogradi: Stereochemistry, Basic Concepts and Applications, Akademiai Kiado, Budapest 1981.
- E. Eliel, S. H. Wilen: Stereochemistry of Organic Compounds, Wiley Interscience, New York 1994.
- E. Juaristi: Introduction to Stereochemistry, Conformational Analysis, Wiley, New York 1991.
- R. A. Aitken, S. N. Kilenyi (ur.): Asymmetric Synthesis, Blackie Academic, London 1994.
- M. Nogrody: Stereoselective Synthesis, A Practical Approach, Verlag Chemie, Weinheim 1995.

DOPUNSKA LITERATURA

- G. M. Coppola, H. F. Schuster: Asymmetric Synthesis, Construction of Chiral Molecules Using Amino Acids, Wiley, New York 1987.
- A. I. Meyers, Acc. Chem. Res. 11 (1980) 375.
- G. W. Parshall, S. D. Ittel: Homogeneous Catalysis, Wiley Interscience, New York 1992.
- I. Ojima (ur.): Catalytic Asymmetric Synthesis, Verlag Chemie, Weinheim 1993.
- A. N. Collins, G. N. Sheldrake, J. Crosbi (ur.): Chirality in Industry, Wiley, New York 1992.
- J. D. Morrison (ur.): Chiral Catalysis, Vol. V, Asymmetric Synthesis, Academic Press, London 1985.
- I. Ojima, N. Clos, C. Bastos, Tetrahedron, 45 (1989) 6901.

ECTS BODOVI: 8

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno i usmeno

203: METODE ORGANSKE SINTEZE

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Kata Majerski, znanstvena savjetnica u mirovini, Institut Ruđer Bošković, Zagreb, naslovna redovita profesorica, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb i dr. sc. Marina Šekutor, znanstvena suradnica, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Sredinom 20-tog stoljeća Woodward, Robinson i Eschenmoser pokazuju kako se sinteza molekula može izvesti na jedan jednostavan i logičan način. Takav sintetski put, koji vodi molekulu prema jednostavnijem i komercijalno dostupnom početnom materijalu, Corey naziva retrosintezom. Danas se većina sintetskih problema rješava upravo retrosintetskom analizom. Kolegij će obuhvatiti različite pristupe planiranja sinteze organskih molekula: pronalaženje prikladnih početnih supstrata i pogodnih kemijskih reakcija za postavljenu ciljnu molekulu te retrosintetski pristup transformacija ciljne molekule u sintetske prekursore. U okviru naznačenih pristupa organskoj sintezi bit će obrađeni najvažniji tipovi "sintona" koji u kemijskim reakcijama grade ugljikov skelet ciljnih molekula. Dio kolegija bit će usmjeren i na transformacije funkcijskih skupina te konstrukcijske reakcije veza ugljik-ugljik u organskim sintezama. Također će biti obrađene sljedeće teme: stereokemija i konformacija, kontrola stereokemije pri stvaranju prstenova, zaštitne skupine, pericikličke reakcije, elektrofilne reakcije i reakcije radikala, oksidacije i redukcije, a bit će prikazani izabrani primjeri sinteza velikih i kompleksnih molekula.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Sticanje temeljnih znanja iz područja sinteze organskih spojeva

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, seminari i konsultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- Paul Wyatt and Stuart Warren: Organic synthesis: strategy and control, Chichester, England ; Hoboken, NJ : John Wiley, c2007
- W. A. Smith, A. F. Bochkov, R. Caple: Organic Synthesis, Thomas Graham House, Cambridge 1998.
- J. Corey, X-M. Cheng: The Logic of Chemical Synthesis, Wiley, New York 1989.

DOPUNSKA LITERATURA

- T. A. Hase: Unpoled Synthons: A Survey of Sources and Uses in Synthesis, Wiley, New York 1987.
- B. M. Smith: Organic Synthesis: Theory, Reactions and Methods, McGraw-Hill 1994.
- D. Lednicer: Strategies for Organic Drug Synthesis and Design, Wiley, New York 1998.
- B. M. Smith, J. March: Advanced Organic Chemistry, 5th Ed., Wiley, New York 2001.

ECTS BODOVI: 8

NAČIN POLAGANJA ISPITA: Pismeno i usmeno

204: REAKCIJSKI MEHANIZMI U ORGANSKOJ KEMIJI

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Hrvoj Vančik redoviti profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Kvantitativni odnos molekularne strukture i kemijske reaktivnosti: Hammettova jednadžba, ne-linearne Hammetove korelacije, Yukawa-Tsuno jednadžba i njihova primjena. Kiselo-bazne ravnoteže: kratki pregled osnovnih pojmova, mjerenje kiselosti organskih spojeva u plinskoj fazi, svojstva i reaktivnost karbaniona (utjecaj supstituenata na stabilnost, aromatični i antiaromatični anioni, unimolekularne pregradnje, karbanioni u pripravi organometalnih spojeva), utjecaj otapala na kiselost, utjecaj elektronske pobude na kiselobazna svojstva, reakcije intra- i intermolekularnog prijenosa protona u osnovnom i elektronski pobuđenim stanjima (eksperimentalni i kvantno-kemijski pristupi). Izolacija i spektroskopija reakcijskih međuprodukata: matična izolacija (IR, UV, ESR, NMR), reakcijski međuprodukti u superkiselinama, ultrabrze spektroskopije. VB-Model i studij reakcijskih mehanizama: VB-model i aromatičnost, SN1 i SN2 reakcije, Marcusova teorija prijenosa. Reakcije u čvrstom stanju. Autokataliza i samoreplikacijski mehanizmi.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Sticanja temeljnih znanja iz područja reakcijskih mehanizama i njihove primjene u organskoj kemiji.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, seminari i konsultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- E.V. Anslyn, D.A. Dougherty: Modern Physical Organic Chemistry, University Science Books, Sausalito, Cal. 2004.
- H. Maskill (Ed): The Investigations of Organic Reactions and their Mechanisms, Blackwell Publishing 2006.
- H. Maskill: Structure and Reactivity in Organic Chemistry, 2nd Ed.. Oxford Science Publ., Oxford 2000.
- T.H. Lowry, K. S. Richardson: Mechanism and Theory in Organic Chemistry, 3rd Ed., Harper Int. Edition, New York 1998.

DOPUNSKA LITERATURA

- S. Scheiner: Hydrogen Bonding: A Theoretical Perspective, Oxford University Press, Oxford 1997.
- M. Klessinger, J. Michl: Excited States and Photochemistry of Organic Molecules, Verlag Chemie, Weinheim 1995.
- S. S. Shaik, H. B. Schlegel, S. Wolfe: Theoretical Aspects of Physical Organic Chemistry, Wiley, New York 1992.
- M.S. Platz, R.A. Moss and M. Jones (Eds): Reviews in Reactive Intermediate Chemistry, Wiley, New York, 2007.

ECTS BODOVI: 8

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno i usmeno

251: ORGANSKA FOTOKEMIJA

NASTAVNICI: dr. sc. Nikola Basarić, znanstveni savjetnik, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA: Osnovni zakoni fotokemije. Primarni fotofizički procesi (apsorpcija, elektromagnetskog zračenja, elektronski prijelazi, pobuđena stanja, radijacijski i neradijacijski procesi deaktivacije iz pobuđenih stanja, dijagram Jablonskoga, kvantni prinos, orbitalna simetrija, korelacijski dijagrami, plohe potencijalne energije, stožasti presjeci). Eksperimentalne metode u fotokemiji i fotofizici (apsorpcijska i emisijska spektroskopija, laserska fleš fotoliza, vremena života). Prijenos energije (teorijske osnove i primjena, senzibilizacija i gašenje). Kompleksi u pobuđenom stanju (ekscimeri, ekscipleksi, prijelaz elektrona). Fotokemijske reakcije prijelaza protona. Intramolekulske fotokemijske reakcije alkena i poliena (izomerizacije, ciklizacije, pregrađivanja). Intra- i intermolekulske reakcije karbonilnih spojeva. Intermolekulske cikloadicije (cikloadicije alkena, poliena, aromata, te karbonilnih spojeva s alkenima). Fotosupstitucije i fotoadicije (u aromata i heterocikla). Fotokemijske reakcije s kisikom. Primjena fotokemije u tehnologiji i medicini.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Sticanje specifičnih znanja iz područja fotokemije i fotofizike.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, seminari i konsultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- N. J. Turro: Modern Molecular Photochemistry, University Science Books, Sausalito, CA 1991.
- A. Gilbert, J. Baggott: Essentials of Molecular Photochemistry, Blackwell Science, Oxford, 1991.

DOPUNSKA LITERATURA

- P. de Mayo (ur.): Rearrangements in Ground and Excited States, Vol. 3, Academic Press, New York 1980.
- M. Coxon, B. Halton: Organic Photochemistry, 2. izd., Cambridge University Press, Cambridge 1987.
- P. Suppan: Chemistry and Light, The Royal Society of Chemistry, Turpin Distr. Service, Letchworth 1994.

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno i usmeno

252: REAKTIVNI INTERMEIDIJARI U ORGANSKOJ SINTEZI

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Kata Majerski, znanstvena savjetnica u mirovini, Institut Ruđer Bošković, Zagreb, naslovna redovita profesorica, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Kolegij obuhvaća pregled kemije neutralnih reakcijskih intermedijara kao što su: radikali, diradikali, karbeni, nitreni, te napete mono- i policikličke molekule malih prstena. Naglasak je dan na njihovu "suštinsku" prirodu (elektronsku strukturu i geometriju, fizička i kemijska svojstva, njihovu reaktivnost i selektivnost) te na identifikaciju i primjenu u organskoj sintezi. Važnost intermedijara uočena je vrlo rano i studirana je obzirom na mogući reakcijski mehanizam osnovan na kinetskim, stereokemijskim i sintetskim činjenicama. Dugo vremena su reaktivni intermedijari smatrani samo kao "prolazne" kratkoživuće vrste. Razvojem modernih kemijskih tehnika mnogi intermedijari su direktno opaženi, okarakterizirani ili čak izolirani (u čvrstim matricama na niskim temperaturama). Analiza reaktivnih intermedijara biti će prikazana na primjerima sinteze organskih spojeva kroz reakcije koje uključuju ove reaktivne vrste. To će omogućiti studentima proširenje znanja iz ovog područja preko najnovije literature.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Sticanje specifičnih znanja o mogućim intermedijarima preko kojih se odvijaju reakcije u organskoj kemiji.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, seminari i konsultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- R. A. Moss, M. S. Platz, M. Jones, Jr., Reactive Intermediate Chemistry, Wiley, New York, 2004.
- J. F. Liebman and A. Greenberg, Structure and Reactivity, J. Wiley and Sons inc. 1989.

DOPUNSKA LITERATURA

- M. Regitz: Carbene(oide), Carbene: Methoden der organischen Chemie, Vol. 1, 2, Georg Thieme Verlag, Stuttgart 1989.
- M. Regitz: C-Radical: Methoden der Organischen Chemie, Vol. 1, 2, Georg Thieme Verlag, Stuttgart 1989.
- K. Mlinarić-Majerski, S. Starčević: Reaktivne molekule - karbeni, Kem. Ind. 40 (1991) 5.
- W. Sander, G. Bucher, S. Wierlacher, Chem. Rev. 93 (1993) 1583.
- U. H. Brinker, Advances in Carbene Chemistry, Vol. 2, 1998, JAI Pressinc. 1998.

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno i usmeno

253: KEMIJA UGLJIKOHIDRATA I GLIKOPROTEINA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Srđanka Tomić-Pisarović, redovita profesorica, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Predmet uvodnih predavanja bit će osnovni pojmovi iz područja strukture, nomenklature i stereokemije monosaharida, potrebni za razumijevanje kompleksnih fenomena u ugljikohidratnoj kemiji, npr. procesa mutarotacije i anomernih efekata, koji će zatim biti razmatrani s različitim (energetskih, strukturnih, kinetičkih) aspekata. Nadalje, analizirat će se odnos strukture i biološke aktivnosti u prirodi rasprostranjenih oligosaharida i glikoproteina te značaj sintetskih ugljikohidrata u biologiji i medicini. Prezentirati će se najnoviji sintetski pristupi biološki aktivnim glikokonjugatima, oligosaharidima i glikopeptidima. Posebno će biti razmatrana sinteza glikozida enzimskom metodom te sinteza glikopeptida na krutom nosaču. Obradit će se i vrlo aktuelno područje ugljikohidratne kemije koje obuhvaća složene reakcije između reducirajućih šećera i aminokiselina ili peptida (Maillardova reakcija).

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Sticanje specifičnih znanja iz područja kemije spojeva koji sadrže ugljikohidrate te njihova primjena u biologiji i medicini.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, seminari i konsultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

R.W. Binkley: Modern Carbohydrate Chemistry, (Food Science and Technology, Vol. 27), Marcel Dekker, New York 1988.

T. K. Lindhorst: Essentials of Carbohydrate Chemistry and Biochemistry, Wiley-VCH Verla GmbH & Co. KGaA, Weinheim, Germany, 2003.

B. Ernst, G. W. Hart, P. Sinaÿ: Carbohydrates in Chemistry and Biology, Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim, Germany, 2000.

H. Driguez, J. Thiem: Glycoscience, Synthesis of Oligosaccharides and Glycoconjugates, Springer-Verlag, New York, 1999..

DOPUNSKA LITERATURA

A.E. Flood, M.R. Johns, E.T. White, Carbohydr. Res. 288 (1996) 45;

S.J. Angyal, Carbohydr. Res. 263 (1994) 1.

J. Plavec, W. Tong; J. Chattopadhyaya, J. Am. Chem. Soc. 115 (1993) 9734; I. Tvaroška, T. Bleha, Adv. Carbohydr. Chem. Biochem 47 (1989) 45.

C. Traving, R. Schauer, Cell. Mol. Life Sci. 54 (1998) 1330.

J.M. Coteron, K. Singh, J.L. Asensio, M. Dominguez-Dalda, A. Fernandez-Mayoralas, J. Jimenez-Barbero, M. Martin-Lomas, J. Abad-Rodriguez, M. Nieto-Sampedro, J. Org. Chem. 60 (1995) 1502.

I. Brockhausen, J. Schutzbach, W. Kuhns, Acta Anatomica 161 (1998) 36.

S.D. Shiyani, N.V. Bovin, Glycoconjugate J. 14 (1997) 631.

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno i usmeno

254: SUPRAMOLEKULSKA KEMIJA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Mladen Žinić, znanstveni savjetnik, naslovni redoviti profesor u mirovini, Institut Ruđer Bošković, Zagreb; dr. sc. Leo Frkanec, viši znanstveni suradnik, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Primjeri prirodnih supramolekulskih sustava. Značajke biokemijskih procesa - organska kemija *in vivo*. Sinteza i svojstva krunastih etera i kriptanada. Vežanje, ekstrakcije i transport metalnih kationa kroz prirodne i umjetne membrane. Prirodni i sintetski prenosioci metalnih kationa - ionofori. Razvoj sintetskih receptora sa svojstvom molekulskog prepoznavanja. Kaliksareni, karcerandi, sferandi i politopski sintetski receptori. Molekulsko prepoznavanje biološki važnih molekula, aminokiselina, peptida i nukleotida. Termodinamičke značajke tvorbe supramolekulskih kompleksa. Vezne interakcije u supramolekulskoj kemiji: elektrostatske međuionske interakcije, vodikove veze, van der Waals-ove i aromatske - interakcije, solvofobni efekti. Supramolekulska sinteza i supramolekulska kiralnost. Razvoj funkcionalnih supramolekulskih sustava s mehanizmom regulacije. Razvoj supramolekulskih kemosenzora. Projektiranje i sinteza supramolekulskih asocijata nano- dimenzija. Molekule sa svojstvom samoorganiziranja. Sinteze novih supramolekulskih materijala. Pokazne vježbe iz primjene molekulskog modeliranja računalom, s pomoću programskih paketa SYBYL i BIOSYM.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Sticanje specifičnih znanja o prirodnim i sintetskim supramolekulskim sustavima.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, seminari i konsultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- J.-M. Lehn: Supramolecular Chemistry. Concepts and Perspectives, Verlag Chemie, Weinheim 1995.
- H. Dugas: Bioorganic Chemistry. A Chemical Approach to Enzyme Action, 2nd. Ed., Springer-Verlag, New York, 1988.
- J. Fraser Stoddart (ur.): D. J. Cram, J. M. Cram: Container Molecules and Their Guests, Monographs in Supramolecular Series, Royal Soc. Chem., Cambridge 1994.
- H.-J. Schneider, H. Durr (ur.): Supramolecular Organic Chemistry and Photochemistry, Verlag Chemie, Weinheim 1991.

DOPUNSKA LITERATURA

- J.-M. Lehn, Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 27 (1988) 89; 29 (1990) 1304.
- C. J. Pedersen, *ibid.* 27 (1988) 1053.
- D. J. Cram, *ibid.* 27 (1988) 1009.
- A. J. Kirby, *ibid.* 35 (1996) 707.
- J. Rebek, Jr., Chem. Brit. (1994) 286.
- D. Philp, J. F. Stoddart: Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 35 (1996) 1154.
- A. W. Czarnik: Fluorescent Chemosensors for Ion and Molecule Recognition, ACS Symp. Ser. 538, 1992.
- V. Balzani, F. Scandola: Supramolecular Photochemistry, Ellis Horwood Ser. in Physical Chem. 1991.

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno i usmeno

255: OSNOVE BIOORGANOMETALNE KEMIJE

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Vladimir Rapić, redoviti profesor u mirovini, Prehrambeno-biotehnološki fakultet, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA

Definicija bioorganometalne kemije. Prirodni bioorganometalni spojevi (vitamin B₁₂, Fe/ Ni-hidrogenaza). Kompleksi organometalnih liganada s biomolekulama. Biološka aktivnost bioorganometalnih konjugata. Molekulska prepoznavanje s pomoću bioorganometalnih spojeva. Organometalni kompleksi u sintezi biomolekula. Obilježavanje biomolekula s organometalnim spojevima. Stabiliziranje i aktivacija biomolekula. Ferocenski konjugati s prirodnim aminokiselinama, peptidima i nukleinskim kiselinama. Metaloceni kao osjetljive sonde za detekciju biomolekula – imunotestovi. Uloga biokonjugata u detekciji hibridizacije DNA. Peptidne nanocijevi Antitumorski agensi. Kemosenzori. Primjena bioorganometalnih spojeva u farmakologiji, biomedicini. Industrijska primjena bioorganometalnih spojeva.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Sticanje specifičnih znanja iz područja prirodnih i sintetskih bioorganometalnih spojeva i njihove primjene.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, seminari i konsultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- W. Beck et al., Bioorganometallic Chemistry-Transition Metal Complexes with α -Amino Acids and Peptides, *Angew. Chem. Int. Ed.* 37 (1998) 1634.
- D. R. van Stavern, N. Metzler-Nolte, Bioorganometallic Chemistry of Ferrocene, *Chem. Rev.* 104 (2004) 5931.
- N. Metzler-Nolte, Labeling of Biomolecules for Medicinal Applications-Bioorganometallic Chemistry at Its Best, *Angew. Chem. Int. Ed.* 40 (2001) 1040.
- G. Jaouen et al., Bioorganometallic chemistry: Structural diversity of organometallic complexes with bioligands and molecular recognition studies of several supramolecular hosts with biomolecules, alkali-metal ions, and organometallic pharmaceuticals, *Organometallics* 22 (2003) 2166.

DOPUNSKA LITERATURA

- H.-B. Kraatz, *J. Inorg. Organomet. Polymers Mat.* 15 (2005) 83.
- G. Jaouen et al., *Current Medicinal Chem.* 11 (2004) 2505.

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno i usmeno

256: KOMPUTACIJSKA KEMIJA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Zlatko Mihalić, redoviti profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA

Upoznavanje modernih računskih metoda koje se rabe za tumačenje i predviđanje strukture i reaktivnosti molekula i molekulskih nakupina. Kolegij uključuje i praktični rad na računalima. Pregled metoda, strukture računskih programa, optimizacijske tehnike: molekulska mehanika i dinamika, kvantnomehaničke metode - semiempirijske, *ab initio*, DFT, VB-metode. Razmatranje djelotvornosti metoda, primjenjivost na pojedine probleme: predviđanje molekulske strukture malih molekula i makromolekula, predviđanje njihovih reaktivnosti modeliranjem prijelaznih struktura, pobuđenih stanja, stereoelektronskih svojstava; međumolekulska međudjelovanja; utjecaj otapala. Uporaba grafičkih prikaza modela molekula, konformacijska analiza, simuliranje spektara.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Sticanje specifičnih teorijskih i praktičnih znanja iz područja računalne kemije.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, seminari i konsultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- A. R. Leach: Molecular Modelling, Principles and Applications, Longman, London 1996.
- F. Jensen: Introduction to Computational Chemistry, Wiley, New York 1998.
- W. J. Hehre: Practical Strategies for Electronic Structure Calculations, Wavefunction, Inc., New York 1995.
- P. W. Atkins, R. S. Friedman: Molecular Quantum Mechanics, 3rd Ed., Oxford University Press., Oxford 1997.
- W.J. Hehre, L. D. Burke, A. J. Shusterman, W. W. Huang: A Laboratory Book of Computational Organic Chemistry, Wavefunction, Inc., New York 1993.

DOPUNSKA LITERATURA

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: usmeno i seminarom

257: ODNOSI KEMIJSKE STRUKTURE I SVOJSTAVA

AUTOR(I): dr. sc. Aleksandar Sabljic, znanstveni savjetnik, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Opći dio: Modeli kemijske strukture; Pregled svojstava i ponašanje molekula; Velike baze podataka (pretraživanje, kvaliteta podataka, pogreške u podacima); Statističko modeliranje (klasične numeričke metode, multivarijatne analize (PCA, PLS), statistički dizajn i testovi, kvaliteta modela i slučajne korelacije), Grafička analiza podataka, Metode umjetne inteligencije. *Strukturna svojstva:* Parametri veličine i pokretljivosti molekule; Površina i volumen molekula (van der Waals model, dostupna površina molekula, računanje površine i volumena molekula), Elektronski parametri i spektroskopska svojstva; Interakcije “malih” molekula s velikim sustavima (“receptorima” - DNA, RNA, peptidima); Simulacija strukture, svojstava i složenih sustava. *Kvantitativni modeli kemijske strukture:* Struktura molekula u plinskoj fazi, otopini i kristalu, Termodinamika i energijski parametri molekula u otopini; Free-Wilson-ov model, BC(DEF) model; Hansch-ov model; Kamlet-Taft-ov model; Teorijski analog Kamlet-Taft-ovog modela. *Primjena kvantitativnih modela:* Mogućnosti predviđanje kolektivnih molekulskih svojstava (vrelišta, tališta, kromatografskih indeksa), reaktivnosti molekula (reaktivnost s radikalima, inhibicija enzimske aktivnosti), pokretljivosti i postojanost kemikalija u okolišu (vezanje na tlo, procesi kemijske razgradnje, mikrobiološka razgradnja).

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Sticanje specifičnih znanja iz područja teorijskih razmatranja odnosa kemijske strukture i svojstava molekula.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, seminari i konsultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- D. L. Massart, B. G. M. Vandeginste, S.N. Deming, Y. Michotte, L. Kaufman: Chemometrics: A Textbook, Elsevier, Amsterdam 1988.
- C. Jochum, M. G. Hicks, J. Sunkel, (ur.): Physical Property Prediction for Organic Chemicals, Springer Verlag, Heidelberg 1988.
- N. Trinajstić: Chemical Graph Theory, CRC Press, Boca Raton 1993.
- H. van de Waterbeemd, B. Testa, G. Folkers, (ur.): Computer-Assisted Lead Finding and Optimization, Wiley-VCH, Weinheim 1997.
- H. A. J. Govers, G. Schürmann, (ur.): QSAR Techniques in Environmental Sciences and Drug Design, Wiley, London 1999.

DOPUNSKA LITERATURA

- W. Karcher, J. Devillers, (ur.): Practical Applications of Quantitative Structure-Activity Relationships (QSAR), Environmental Chemistry and Toxicology, Kluwer, Dordrecht 1990.
- M. Šoškić, A. Sabljic, Kem. Ind. 40 (1991) 401.
- L. Eriksson, M. Sjöström, S. Wold, (ur.): QSAR Special Issue, Journal of Chemometrics 10 (2) 1996.
- H. A. J. Govers, G. Schürmann, (ur.): QSAR Techniques in Environmental Sciences and Drug Design, Wiley, London 1999.

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA pismeno i usmeno

258: NUKLEOZIDI I NUKLEINSKE KISELINE

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Biserka Žinić, znanstvena savjetnica, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA

DNA i RNA: biološka uloga, građa, kemijska svojstva, te konformacija prirodnih nukleozida. **SINTEZE NUKLEOZIDA:** kondenzacije šećera i nukleobaza (metoda teških metala, fuzija, Hilbert-Johnsonova metoda), sinteze nukleozida građenjem heterocikličke baze, zaštitne skupine šećera (reakcije na anomernom centru i ostalim OH-skupinama). **KEMJSKE TRANSFORMACIJE NUKLEOZIDA:** *modifikacije nukleobaza* (elektrofilne supstitucijske i adicijske reakcije na dušikovim atomima u prstenu, supstitucije na egzocikličkim amino-skupinama i kisikovim atomima, elektrofilne supstitucijske i adicijske reakcije na ugljikovim atomima, nukleozidi s prstenskim analogima nukleobaza), *nukleozidi s C-glikozidnom vezom* (pseudouridin), *intramolekulske ciklizacije nukleozida* (modifikacije nukleozida koje uključuju bazu i šećer) *nukleozidi s modificiranim šećerom* (ciklički, aciklički, karbociklički, alifatski analozi), *analozi nukleozida kao antivirusni agensi* (ciklički analozi nukleozida s izraženim antiretrovirusnim djelovanjem, aciklički analozi nukleozida s naglaskom na antiherpetike). **NUKLEOTIDI I OLIGONUKLEOTIDI:** *kemijske sinteze nukleotida* (zaštitne skupine aglikona i egzocikličkih amino-skupina, zaštita internukleotidne i terminalne fosfatne skupine, postupci fosforiliranja nukleozida), stvaranje internukleotidne fosfoesterske veze, *sinteze oligonukleotida* (postupne sinteze u otopini, blok-sinteze u otopini, sinteze na čvrstim nosačima, automatizirana sinteza), *modificirani oligonukleotidi*.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Sticanje specifičnih znanja iz područja prirodnih i sintetskih nukleozida i nukleotida.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, seminari i konsultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- G. Zubay: Biochemistry, 3rd. Ed, W. C. Brown Publishers, Oxford, 1993.
- L.B. Townsend: Chemistry of Nucleosides and Nucleotides, Vol. I, Plenum Press, New York 1988.
- L.B. Townsend: Chemistry of Nucleosides and Nucleotides, Vol. II, Plenum Press, New York 1991.
- L.B. Townsend: Chemistry of Nucleosides and Nucleotides, Vol. III, Plenum Press, New York 1994.
- E. De Clercq, Design of Anti-AIDS Drugs, Elsevier, Amsterdam 1990.
- R. S. Schinazi, D. C. Liotta, Frontiers in Nucleosides and Nucleic Acids, IHL press, 2004.
- H. Vorbrüggen, C. Ruh-Pohlenz, *Handbook of Nucleoside Synthesis*; John Wiley, New York, 2001.
- C. K. Chu, Recent Advances in nucleoside chemistry and chemotherapy, Elsevier, Amsterdam, 2004.

DOPUNSKA LITERATURA

- H. Mitsuya, R. Yarchoan, S. Broder, Science 249 (1990) 153.
- D.M. Huryn, M. Okabe, Chem. Rev. 92 (1992) 1745.
- S.L. Beaucage, R.P. Iyer, Tetrahedron 48 (1992) 2223.
- E. De Clercq, Nucleosides & Nucleotides 13 (1994) 1271.
- L.J. Wilson, M.W. Hager, Y.A. El-Kattan, D.C. Liotta, Synthesis (1995) 1465.
- S. Knapp, Chem. Rev., 95 (1995) 1859.
- D.L.J. Clive, P.L. Wickens, P.W.M. Sgarbi, J. Org. Chem. 61 (1996) 7426.
- P.Y. Wang, J.H. Hong, J.S. Cooperwood, C.K. Chu, Antiviral Res. 40 (1998) 19.
- S.F. Pan, N.M. Amankulor, K. Zhao, Tetrahedron 54 (1998) 6587.
- C. Meier, Synlett. (1998) 233.
- S.Guillarme, S.Legoupy, A.-M.Aubertin, C.Olicard, N.Bourgougnon, F.Huet, Tetrahedron 59 (2003) 2177-2184.
- D.Crich, V. Dudkin, J. Am. Chem. Soc. 123 (2001) 6819-6825.
- 112.H.J. Jessen, W. Fendrich, C. Meier, European Journal of Organic Chemistry 2006, 924-931.
- 115.O. R. Ludek, J. Balzarini, T. Krämer, C. Meier, Synthesis 2006, 1313-1323.
- 118.O. R. Ludek, C. Meier, Synlett 2006 (2), 324-326.

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno i usmeno

259: MEDICINSKA KEMIJA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Milan Mesić, viši znanstveni suradnik i naslovni izvanredni profesor, Fidelta d.o.o.

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA

U ovom se kolegiju obrađuju izabrana poglavlja sintetske organske kemije s posebnim osvrtom na dizajn i sintezu lijekova i vitamina. U ovom kolegiju će se razmatrati sinteza "malih molekula" heterocikličkih spojeva s dušikom, kisikom i sumporom (piridinski, pirimidinski, imidazolski, tiofenski, pirazolski, pirolni, tiazolni i sl.) s različitom terapijskom primjenom. Osim ove vrste spojeva, biti će riječi o polusintetskim antibioticima: tetraciklinima (klortetraciklin, metaciklin, doksiciklin), beta-laktamima (penicilini i cefalosporini) te o makrolidnim antibioticima, s posebnim osvrtom na sintezu azitromicina i klaritromicina. Sintetski pristupi dobivanju pojedinih vitamina (npr. B6, C i dr.) te lijekova koji se iz njih izvode biti će također obrađivani. Osim sinteze, biti će govora i o važnosti pojedinih strukturalnih elemenata i fizikalno-kemijskih svojstava na farmakološko djelovanje pojedinih skupina lijekova te osnovne značajke mehanizma njihova učinka na bolest.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Stjecanje specifičnih znanja iz područja sinteze lijekova i vitamina te osnove za razumijevanje interdisciplinarnog područja medicinske kemije.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, seminari i konsultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- Lednicher: Strategies for organic drug synthesis and design, John Wiley and Sons, 1998.
- G.L. Patrick, An Introduction to Medicinal Chemistry, Oxford University Press.2001.

DOPUNSKA LITERATURA

- M. Mintas, S. Raić-Malić, N. Raos: Načela dizajniranja lijekova, Hinus, Zagreb 2000.
-

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: seminarski rad i javno izlaganje uz diskusiju

260: PRIMJENA SPEKTROSKOPIJE NMR U ODREĐIVANJU STRUKTURE I DINAMIKE (BIO)ORGANSKIH MOLEKULA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Dražen Vikić-Topić, znanstveni savjetnik, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA

Osnove i načela. NMR-aktivne jezgre važne za (bio)organsku kemiju (^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{17}O , ^{19}F , ^{31}P , itd.). Primjena dvodimenzionalne NMR spektroskopije u organskoj i bioorganskoj kemiji: * Spektroskopija korelacije kemijskih pomaka. Korelacija uslijed sprege spin-spin (COSY, RELAYH, HETCOR itd.). Korelacija uslijed relaksacije dipol-dipol i kemijske zamjene (NOESY, ROESY itd.). *Spektroskopija razlučenja sprege spin-spin od kemijskih pomaka (2DJ-resolved). *Spektroskopija višestrukih kvantnih prijelaza (DQCOSY, INADEQUATE, itd.). Efekti dugog dosega u NMR spektroskopiji: supstituentna i izotopna djelovanja na kemijske pomake, spin-spin spregu, dipol-dipol interakcije. Utvrđivanje strukture s pomoću nuklearnog Overhauserova efekta (NOE). Nove višedimenzionalne metode NMR (inverzne tehnike: HSQC, HMBC; gradijentna spektroskopija: GRASP; 3D tehnike, itd). Dinamička spektroskopija NMR. NMR organskih i bioorganskih spojeva s metalima (^{51}V , ^{59}Co , ^{113}Cd , ^{183}W , ^{195}Pt , ^{199}Hg).

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Sticanja specifičnog znanja iz područja identifikacije organskih molekula uporabom nuklearne magnetske rezonancije.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, seminari i konsultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- H. -O. Kalinowski, S. Berger, S. Braun: Carbon-13 NMR Spectroscopy, Wiley, Chichester 1991.
- J. Schraml, J. M. Bellama: Two-dimensional NMR Spectroscopy, Wiley, New York 1988.
- H. Friebolin: Basic One- and Two-dimensional NMR Spectroscopy, VCH, Weinheim 1993.
- Eds. W. R. Croasmun, R. M. K. Carlson: Two-dimensional NMR Spectroscopy-Applications for Chemists and Biochemists, VCH, Weinheim 1994.

DOPUNSKA LITERATURA

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno, usmeno i seminarom

261: DIZAJNIRANJE LIJEKOVA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Mladen Mintas, redoviti profesor u mirovini, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu; dr. sc. Nenad Raos, znanstveni savjetnik, Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA

Temeljna načela interdisciplinarnog pristupa dizajniranja lijekova. Stereokemijska načela djelovanja lijekova: međudjelovanje lijeka i receptora. Predviđanje i tumačenje ljekovitog djelovanja. Kvalitativni pristup: farmakofori, farmakokinetički faktori. Heuristički pristup: kvantitativni suodnos strukture i djelovanja lijekova (QSAR). Mehanistički pristup: molekularno modeliranje: molekularna mehanika, kvantokemijske metode, indirektno metode, modeliranje lijeka prema strukturi receptora, pristajanje u aktivno mjesto enzima. – docking. Primjeri učinkovitih lijekova razvijenih temeljem navedenih načela.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Sticanje specifičnih znanja iz područja multidisciplinarnog dizajniranja lijekova.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, seminari i konsultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- M. Mintas, S. Raić-Malić, N. Raos: Načela dizajniranja lijekova, Hinus, Zagreb 2000.
- N. Raos, S. Raić-Malić, M. Mintas: Lijekovi u prostoru: farmakofori i receptori, Školska knjiga, Zagreb 2005.

DOPUNSKA LITERATURA

- C. G. Wermuth: The Practice of Medicinal Chemistry, Academic Press, Amsterdam 2003.
- J. Saunders: Top Drugs-Top Synthetic Routes, Oxford University Press, Oxford 2000.
- C. R. Ganellin, S. M. Roberts: Medicinal Chemistry-The Role of Organic Chemistry in Drug Research, Academic Press, London 1993.

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno i usmeno

262: BIOTRANSFORMACIJE U ORGANSKOJ KEMIJI

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Srđanka Tomić-Pisarović, redovita profesorica, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA

Enzimi kao biokatalizatori u organskoj sintezi: dobivanje i čišćenje enzima, dizajniranje funkcionalnih enzima, imobiliziranje enzima, enzimska bioinformatika, uporaba enzima u organskim otapalima, enzimska kinetička resolucija. Uporaba enzima kao katalizatora u sintezi i hidrolizi C-O veza, C-N veza, nastajanju i cijepanju P-O veza, nastajanju C-C veza. Enzimi u reakcijama oksidacije i redukcije, izomerizacijama, uvođenju i uklanjanju zaštitnih skupina. Primjena biokatalize u industrijskim procesima. Uporaba modificiranih enzima, polusintetičnih enzima i katalitičkih protutijela u organskoj sintezi.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Sticanje specifičnih znanja o biokatalitičkim transformacijama u organskoj sintezi.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, seminari i konsultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- K. Faber: Biotransformations in Organic Chemistry, 5th Ed., Springer, Berlin 2004.
- K. Drauz, H. Waldmann (ur.): Enzyme Catalysis in Organic Synthesis, 2nd Ed., Wiley-VCH, Weinheim 2002.

DOPUNSKA LITERATURA

- H. Waldmann, D. Sebastian: Enzymatic Protecting Group Techniques, Chem. Rev. 94 (1994) 911.

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno i usmeno

263: SUVREMENE METODE SINTEZE HETEROCIKLA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Ines Primožič, izvanredna profesorica, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

U okviru ovog kolegija dat će se sustavan pregled najnovijih metoda sinteze heterocikličkih sustava. Uvodno će se razmatrati osnovni pojmovi vezani uz heterocikličku kemiju i 'klasične' postupke sinteze heterocikličkih sustava. Nadalje, detaljno će biti analizirani primjeri vezani uz: • paladijem i prijelaznim metalima katalizirane reakcije; • asimetrične sinteze heterocikličkih spojeva; • sinteze uz upotrebu mikrovalnog zračenja; • heterocikličke sinteze preko radikalnih reakcija; • totalne sinteze kompleksnih heterocikličkih prirodnih produkata; • nove procese za sinteze biološki aktivnih heterocikla.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Sticanje specifičnih znanja o modernim sintetskim metodama pripreme heterocikličkih spojeva.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, seminari i konsultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

• znanstveni i revijalni članci, znanstvene monografije

DOPUNSKA LITERATURA:

- J.A. Joule, K. Mills, *Heterocyclic Chemistry*, 4th Ed., Blackwell Science, 2000.
- J. Bergman, H. C. Van der Plas, M. Simonyi, *Heterocycles in Bio-Organic Chemistry*, The Royal Society of Chemistry 1991.

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno i usmeno

264: STRUKTURA, FUNKCIJA I SINTEZA PEPTIDA/PROTEINA I NJIHOVIH KONJUGATA

NASTAVNICI: : dr. sc. Ivanka Jerić, viša znanstvena suradnica, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Uvod - peptidi, proteini i njihovi konjugati

- struktura i uloga u biološkim procesima
- uloga kao modela za izučavanje bioloških procesa

Metode sinteze peptida i proteina

- prednosti i nedostaci kemijskih i enzimskih metoda peptidne sinteze, te važnost kemoenzimskog pristupa sintezi peptida/proteina
- zaštitne skupine, aktivacija, uklanjanje zaštitnih skupina, sinteza peptida u otopini i na krutom nosaču
- modificirani peptidi i peptidni mimetici

Pregled kemijskih metoda sinteze peptida/proteina

- postepena sinteza
- metoda fragmentarne kondenzacije
- usmjerena kondenzacija
- primjeri, prednosti i ograničenja pojedinih metoda

U kojegiju će biti riječi o strukturi i funkciji, metodama sinteze i primjeni u istraživanjima sljedećih skupina spojeva: *glikoproteini*, *lipoproteini*, *fosfopeptidi* i *nukleopeptidi*.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA:

Temeljna znanja o peptidima i proteinima usvojenim na dodiplomskom studiju proširuju se na područje proteinskih konjugata. Razumijevanje uloge peptida, proteina i njihovih konjugata u biološkim procesima. Razumijevanje pristupa razvoju modificiranih peptida/proteina i njihovih mimetika. Pristup kemijskoj sintezi proteinskih konjugata i njihova primjena kao modela za izučavanje bioloških procesa i za razvoj novih terapeutika. Usvajanje važnosti inter-disciplinarnog pristupa rješavanju problema u post-genomskoj eri.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja i seminari.

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

1. F. Albericio, Developments in peptide and amide synthesis. *Curr. Opin. Chem. Biol.* **8** (2004) 211-221.
2. L. P. Miranda i P. F. Alewood, Challenges for protein chemical synthesis in the 21st century: bridging genomics and proteomics. *Biopolymers*, **55** (2000) 217-226.
3. G. Casi i D. Hilvert, Convergent protein synthesis. *Curr. Opin. Struct. Biol.* **13** (2003) 589-594.
4. L. Liu, C. S. Benett i C.-H. Wong, Advances in glycoprotein synthesis. *Chem. Commun.* (2006) 21-33.
5. D. Kadereit i H. Waldmann, Chemoenzymatic synthesis of lipidated peptides. *Monatshefte für Chemie*, **131** (2000) 571-584.
6. J. S. McMurray, D. R. Coleman IV, W. Wang i M. L. Campbell, The synthesis of phosphopeptides. *Biopolymers*, **30** (2001) 3-31.
7. S. Flohr, V. Lungmann i H. Waldmann, Chemoenzymatic synthesis of nucleopeptides. *Chem. Eur. J.* **5** (1999) 669-681.

DOPUNSKA LITERATURA:

1. T. Kappes i H. Waldmann, Enzymatic synthesis of peptide conjugates: Tools for the study of biological phenomena. *Liebigs Ann./Recueil* (1997) 803-813.
2. R. E. Banks, M. J. Dunn, D. F. Hochstrasser, J. C. Sanchez, W. Blackstock, D. J. Pappin i P. J. Selby, Proteomics: new perspectives, new biomedical opportunities. *Lancet* **356** (2000) 1749-1756.
3. T. Durek i C. F. W. Becker, Protein semi-synthesis: new proteins for functional and structural studies. *Biomol. Eng.* **22** (2005) 153-172.

-
4. J. Reinders i A. Sickmann, State-of-the-art in phosphoproteomics. *Proteomics*, **5** (2005) 4052-4061.
 5. L. Debethune, V. Marchan, G. fabregas, E. Pedroso i A. Grandas, Towards nucleopeptides containing any trifunctional amino acid (II). *Tetrahedron*, **58** (2002) 6965-6978.
 6. T. Kimmerlin i D. Seebach, 100- years of peptide synthesis: ligation methods for peptide and protein synthesis with applications to β -peptide assemblies, *J. Peptide Res.* **65** (2005) 229-260.
 7. B. L. Nilsson, M. B. Soellner i R. T. Raines, Chemical synthesis of proteins. *Annu. Rev. Biophys. Biomol. Struct.* **34** (2005) 91-118.
 8. S. Hanson, M. Best, M. C. Bryan i C.-H. Wong, Chemoenzymatic synthesis of oligosaccharide and glycoproteins. *Trends Biochem. Sci.* **29** (2004) 656-663.
 9. C. Peters, M. Wagner, M. Völkert i H. Waldmann, Bridging the gap between cell biology and organic chemistry: chemical synthesis and biological application of lipidated peptides and proteins. *Naturwissenschaften*, **89** (2002) 381-390.
-

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: Seminarski rad i usmeno izlaganje.

265: RAZVOJ NAJUČINKOVITIJIH LIJEKOVA

NASTAVNICI: dr. sc. Mladen Mintas, redoviti profesor u mirovini, dr. sc. Silvana Raić-Malić, redovita profesorica, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Načela medicinske kemije. *Receptori i djelovanje lijekova:* interakcija lijeka i receptora, ionski kanali, receptori vezani za G-protein, nuklearni receptori, proteinske kinaze, unutarstanični receptori za regulaciju transkripcije gena, antibakterijski inhibitori sinteze proteina, enzimi – mete djelovanja lijekova. *Strategije u razvoju lijekova:* prirodni spojevi kao polazište za razvoj novih lijekova, razvoj novih lijekova na osnovu postojećih lijekova, razvoj novog lijeka prema vrsti bolesti, racionalni pristup dizajniranja lijekova, bioizosterija, prolijekovi.

Razvoj učinkovitih lijekova. Inhibitori enzima prostaglandin-sintetaze: lijekovi protiv boli i upala, inhibitori enzima za konverziju angiotenzina (ACE): lijekovi protiv povišenog krvnog tlaka (antihipertenzivi), blokatori kalijevih kanala: kromakalim i srodni antihipertenzivi, blokatori kalcijevih kanala: lijekovi protiv angine i povišenog krvnog tlaka, antagonisti receptora histamina H_2 : lijekovi protiv čira želučano-probavnog trakta, inhibitori protonske pumpe i lučenja želučane kiseline, antidepresivi na osnovu modifikacija serotonina, lijekovi koji djeluju na benzodiazepinske receptore: hipnotici, anksiolitici, antikonvulzivi i mišićni relaksanti, antagonisti receptora histamina H_1 : lijekovi protiv alergijskog rinitisa, analozi nukleozida-inhibitori HIV reverzne transkriptaze kao lijekovi protiv AIDS-a, fluorokinoloni kao antibakterijski inhibitori DNA giraze.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Sticanje temeljnih znanja iz medicinske kemije i njihove primjene u razvoju učinkovitih lijekova.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA:

predavanja, seminari i konsultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

1. M. Mintas, S. Raić-Malić i N. Raos, Načela dizajniranja lijekova, Zagreb, Hinus, 2000, sveučilišni udbenik.
2. N. Raos, S. Raić-Malić i M. Mintas, Lijekovi u prostoru: farmakofori i receptori, Školska knjiga, 2005, sveučilišni udbenik.
3. J. Saunders: Top Drugs-Top Synthetic Routes, Oxford University Press, Oxford, UK, 2000.

DOPUNSKA LITERATURA:

- R. S. Vardanyan, V. J. Hruby, Synthesis of Essential Drugs, Elsevier B.V., Amsterdam, Nizozemska, 2006.
- S. Cox Gad, Drug Discovery Handbook, John Wiley & Sons, Inc., N.Y., USA, 2005.

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno i usmeno

266: ANALITIČKE METODE U ORGANSKOJ SINTEZI

AUTOR PROGRAMA: Dr.sc. Vesna Gabelica Marković, znanstvena suradnica, Fidelta d.o.o.

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Analitičke metode za praćenje kemijskih reakcija; Identifikacija i karakterizacija reakcijskih smjesa; Spregnute tehnike (GC-MS, LC-UV, LC-MS); Priprema uzoraka: uzorkovanje, prikupljanje i ekstrakcija; Ekstrakcija čvrstom fazom (SPE) Purifikacija organskih spojeva; Kromatografske metode; Uloga HPLC-a u organskoj kemiji; Analitička i preparativna kromatografija; "Flash" kromatografija; Odabir najpovoljnije spregnute tehnike za identifikaciju pojedinih klasa molekula. Koraci u određivanju molekulske strukture; Odabir spektroskopske tehnike za karakterizaciju organskih molekula;. Ograničenja i problemi u organskoj strukturalnoj analizi; Analitičke metode u paralelnoj sintezi; Analiza kombinatorijalnih smjesa; "High Throughput" (HT) tehnike; Automatizacija i minijaturizacija.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA:

Stjecanje specifičnih znanja iz područja analitičkih metoda koje se primjenjuju tijekom organske sinteze

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA:

Predavanja, seminari, pokazne vježbe, konzultacije
Provjera znanja biti će pismeni, seminar i usmeni ispit.

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

- P.Crews, J.Rodrigues, M.Jaspars: Organic Structure Analysis, Oxford University Press, 1998
- V.R.Meyer; Practical High-Performance Liquid Chromatography, John Wiley & Sons, 2006
- Analysis and Purification Methods in Combinatorial Chemistry, Vol. 163, John Wiley & Sons, 2004
- Sample Preparation Techniques in Analytical Chemistry, Vol. 162, John Wiley & Sons, 2003

DOPUNSKA LITERATURA:

- W.L.F. Armarego, D.D.Perrin, Purification of Laboratory Chemicals, Butterworth-Heinemann, 2000
- J.H.Simpson, Organic Structure determination, Academic Press, 2008
- H. Schmidt-Traub, Preparative Chromatography, Wiley-VCH, 2005
- Razni revijalni radovi

ECTS BODOVI: 5

281: ODABRANA POGLAVLJA ORGANSKE KEMIJE

AUTOR(I) PROGRAMA: Gostujući nastavnik

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA: ovisno o programu kolegija

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: specifična znanja iz organske kemije

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: ovisno o programu kolegija

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA: ovisno o programu kolegija

DOPUNSKA LITERATURA: revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

Smjer: BIOKEMIJA (B)

301: REGULACIJA EKSPRESIJE GENA, POSLIJESINTETSKE MODIFIKACIJE I TRANSPORT PROTEINA U STANICI

AUTOR PROGRAMA: dr.sc. Slobodan Barbarić, redoviti profesor, Prehrambeno-biotehnološki fakultet, Sveučilište u Zagrebu; dr. sc. Đurđica Ugarković, redovita profesorica, znanstvena savjetnica, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Kontrola ekspresije gena. Molekularni mehanizmi regulacije transkripcije u prokariota (kontrola *lac* operona). Regulacija inicijacije transkripcije u eukariota (*cis*-regulatorni elementi, opći i specifični transkripcijski faktori). Mehanizmi regulacije aktivnosti transkripcijskih faktora. Uloga strukture kromatina u regulaciji transkripcije (kovalentne modifikacije i remodeliranje strukture kromatina). Metode analize protein-DNA i protein-protein interakcije te analize strukture kromatina. Post-transkripcijske modifikacije i procesiranje primarnog transkripta kod eukariota. *Transport proteina u stanične odjeljke i sekrecija proteina:* Sekretorni put (ko-translacijski transport sekretornih i membranskih proteina u endoplazmatski retikulum). Vezikularni transport proteina od endoplazmatskog retikuluma i sekrecija proteina. Signalne sekvencije i mehanizmi transporta proteina u jezgru i mitohondrij. *Post-translacijske modifikacije proteina:* smatanje proteinskog lanca i oligomerizacija, glikozilacija, fosforilacija, proteoliza.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Usvajanje temeljnih znanja i detaljna razrada biokemijskih i molekularno-bioloških mehanizama regulacije ekspresije gena.

OBlici PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, konsultacije, seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- H. Lodish, A. Berk, P. Matsudaira, C. L. Kaiser, M. Krieger, M.P. Scott, L. Zipursky, J. Darnell, MOLECULAR CELL BIOLOGY 7th ed., W. H. Freeman & Co., New York 2012
- B. Levin: Genes IX, Oxford University Press, New York 2007.
- G.M. Cooper: The Cell; a Molecular Approach, 6th ed., ASM Press, Washington, D.C., 2013.
- R.J. White: Gene Transcription; Mechanisms and Control, Blackwell Science Ltd, Malden, USA, 2009.

DOPUNSKA LITERATURA

- Recentni revijalni radovi iz časopisa: Annual Review of Biochemistry, Annual Review of Cell Biology, Trends in Biochemical Science, Trends in Genetics, Science, Nature

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

302: BIOENERGETIKA

AUTOR PROGRAMA: dr. sc. Branimir Bertoša, docent, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Uvod: termodinamika u biokemiji. Molekulska interpretacija termodinamičkih načela. Termodinamičke osobitosti makromolekulskih otopina. Ravnotežna i neravnotežna termodinamika. Bioenergetika: Reverzibilni i ireverzibilni procesi. Mehanizmi pokretanja endergonih procesa u biološkim sustavima. Značenje metastabilnosti; potencijal prijenosa skupine. Enzimski kompleksi. Stanični energijski naboj. Membranske ravnoteže. Transport kroz membrane. Stabilizacija konformacije proteina: Strukturna hijerarhija proteina. Faze smatanja proteinske molekule i stabilizacijske sile. Strukturne i funkcionalne domene. Nekovalentne interakcije: jakost, raspon i prostorna ovisnost. Modeli za opis nekovalentnih interakcija u biokemijskim sustavima. Uloga okoline. Dinamika proteinske strukture. Interakcije ligand-receptor: vrste interakcija, termodinamika interakcija. Višestruke ravnoteže - stehiometrijski i ravnotežni pristup. Analiza eksperimentalnih podataka. Određivanje stehiometrijskih i mjesnih konstanti vezanja. Energetika enzimske katalize i teorija prijelaznog stanja: Koncentracijski profili kompleksa enzim-supstrat. Energija aktivacije. Učinak blizine i orijentacijski učinak i napregnute veze. Utjecaj okoline. Regulacija induciranjem konformacijskih promjena: Kooperativnost i alosteričke interakcije. Mehanizmi kooperativnog vezanja. Negativna kooperativnost. Fiziološko značenje kooperativnosti. Primjeri.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Usvajanje temeljnih znanja iz bioenergetike u svrhu razumijevanja održivosti homeostaze živih sustava u biokemiji.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, konsultacije, seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

- D. A. Harris: Bioenergetics at a Glance, Blackwell Science, Oxford 2005.
- K.E. van Holde, W.C. Johnson, P.S. Ho: "Principles of Physical Biochemistry", Prentice Hall, Upper Saddle River, USA, 1998.
- Miller: "Essentials of chemical biology", J. Wiely, Chichester, 2008.
- G.U. Nienhaus: "Protein-Ligand Interactions – Methods and Application", Human Press Inc., Totowa, New Jersey, 2005.
- R.M.J. Cotterill: "BIOPHYSICS (An Introduction)", J. Wiely, West Sussex, 2006.
- M. Flögel: Scripta biochemica: Bioenergetika, Enzimaska kataliza, FBF, Zagreb 1993-1996.
- T. A. Waigh: "Applied Biophysics- A Molecular Approach for Physical Scientists", J. Wiely, West Sussex, 2007.

DOPUNSKA LITERATURA:

- revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 8

NAČIN POLAGANJA ISPITA: usmeno uz seminarski rad

303: KONTROLNI MEHANIZMI U BIOSINTEZI PROTEINA

AUTOR PROGRAMA: dr.sc. Gruić Sovulj, izvanredna profesorica, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu; dr. sc. Jasmina Rokov Plavec, docentica, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

U živim se organizmima genetička informacija sadržana u nukleinskim kiselinama učinkovito i točno prevodi u aminokiselinske sljedove funkcionalnih proteina. Visoka kvaliteta prijenosa genetičke informacije zahtijeva optimiranje brzine i preciznosti triju polimerizacijskih reakcija – replikacije, transkripcije i translacije. Usporedit će se selektivnost i točnost ključnih, o kalupu ovisnih enzima: DNA-polimeraze, RNA-polimeraze i peptidil-transferaze. Posebna će se pozornost posvetiti pojedinim etapama biosinteze proteina na ribosomu pri kojima se nadzire točnost translacije. Diskutirat će se sljedeći bitni aspekti nastajanja proteina *in vivo*:

- kompromis između brzine i točnosti polimerizacijskih reakcija
- usaglašavanje razine točnosti s utroškom energija za korekciju pogrešaka
- pogreške u translaciji i nagomilavanje nestrukturiranih proteina
- točnost formiranja aminoacil-tRNA
- odabir aminoaciliranih tRNA elongacijskim faktorima
- aktivna uloga ribosoma u vjernosti translacije
- vjernost selekcije tRNA na ribosomu i nadzor interakcija kodon-antikodon (eksperimentalni pristupi i modeli)
- strukturni temelji vjernosti translacije
- navođenje supstrata i efikasnost translacije
- točnost terminacije translacije i otpuštanja polipeptidnog lanca
- događaji u E-mjestu ribosoma i vjernost translacije
- svrsishodnost preuranjene terminacije translacije proteina s pogreškama
- povezanost vjernosti translacije s događajima nakon formiranja peptidne veze
- točnost i efikasnost sinteze organelnih proteina
- točnost i efikasnost sinteze proteina s nestandardnim aminokiselinama

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Usvajanje znanja o suvremenim tehnikama rekombinantne DNA, koje omogućuju pripremu mutiranih proteina; razumijevanje značaja genomskih, transkriptomskih, proteomskih i interaktomskih pristupa u analizi ekspresije stanične genetičke informacije

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, konsultacije, seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

odabrana poglavlja iz standardnih biokemijskih i molekularno-bioloških udžbenika kao npr.:

- J. M. Berg, J. L. Tymoczko, L. Stryer, Biochemistry, seven edition, W. H. Freeman and Company, New York, 2012.
 - D. L. Nelson and M. M. Cox, Lehninger principles of Biochemistry, six edition, Worth Publishers, New York, 2013.
 - D. Voet, J. G. Voet, BIOCHEMISTRY 4th ed., J. Wiley & Sons, New York 2011.
 - H. Lodish, A. Berk, P. Matsudaira, C. L. Kaiser, M. P. Scot, S. L. Zipursky, J. Darnell, Molecular Cell Biology, 7th ed., W. H. Freeman and Company, New York, 2012.
 - N. Budisa, Engineering the Genetic Code, Wiley - VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2006
- poglavlja iz standardnih laboratorijskih priručnika kao npr.:
- J. Sambrook and D. W. Russell, Molecular Cloning - a laboratory manual, third edition, CSHL Press, Cold Spring Harbor, 2001.

DOPUNSKA LITERATURA: revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 8

NAČIN POLAGANJA ISPITA: usmeno ili seminarom (na unaprijed dogovorenu temu); eventualno pisanjem ili izlaganjem prijedloga istraživačkog projekta iz genetičkog i proteinskog inženjerstva

304: METABOLIZAM I ULOGA LIPIDA

AUTOR PROGRAMA: dr.sc. Marko Mesarić, redoviti profesor, Medicinski fakultet, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Izvanstanična razgradnja lipida. Probava i apsorpcija lipida, vrste, struktura i svojstva enzima koji sudjeluju u probavi lipida; transportni sustavi egzogenih i endogenih lipida; regulacije i metabolički poremećaji; Vrste prehrana. *Lipidi kao spremišta energije.* Dugolančane i esencijalne masne kiseline; triacilgliceroli; regulacije i metabolički poremećaji. Sinteza i razgradnja fiziološki značajnih glicerolipida i sfingolipida; vrste, struktura i svojstva enzima koji sudjeluju u razgradnji; regulacije i metabolički poremećaji. *Lipidi kao drugi glasnici.* Mehanizmi kojima se lipidi iz "spremišta" pretvaraju u druge glasnike; lipidi u regulaciji aktivnosti protein kinaze C; fosfatidilinozitol, diacilglicerol, fosfatidna kiselina, ceramidi, sfingozin i srodni spojevi, eikosanoidi kao drugi glasnici. *Analitičke metode identifikacije i određivanja tkivnih lipida.* Kromatografske metode: tankoslojna (TLC i HPTLC), plinska (GC), tekućinska (HPLC), kombinirani sustavi (GC-MS).

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Detaljno upoznavanje strukture i funkcije lipida.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, konsultacije, seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- D. L. Nelson, M. M. Cox, Lehninger principles of biochemistry, W. H. Freeman & Co., 6th ed. New York, 2013.
- R. K. Murray, D. K. Granner, P. A. Mayes, V. W. Rodwel: Harper's Biochemistry, Appleton & Lange, East Norwalk 2003
- R. Montgomery, T. W. Conway, A. A. Spector, D. C. Chappell: Biochemistry, a Case-Oriented Approach, C. V. Mosby Company, St. Louis 1996.
- T. M. Devlin (ur.): Text Book of Biochemistry with Clinical Correlations, Wiley - Liss, New York 2006.

DOPUNSKA LITERATURA

- revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5 bodova

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

305: ENZIMI: KINETIKA I MEHANIZMI REAKCIJA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr.sc. Ita Gruić Sovulj, izvanredna profesorica, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu; dr.sc. Zrinka Kovarik, znanstvena savjetnica, Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Zagreb; dr. sc. Zoran Radić, Department of Pharmacology University of California, San Diego, SAD

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Kemijska kataliza (teorija prijelaznog stanja, principi katalize, kovalentna kataliza, kinetički izotopni efekt); Temeljne jednačbe enzimске kinetike (kinetika ustaljenog stanja, Michaelis-Menten model, inhibicija, multisupstratni sistemi); Određivanje i značenje pojedinačnih koeficijenata brzina reakcija (konvencionalne metode, metode brzih reakcija - zaustavljeni tok, relaksacija, gašenje, analiza kinetike predstacionarnog stanja i kinetike relaksacije, međustupnjevi reakcije); Utjecaj pH na enzimsku katalizu; Metode za mjerenje kinetike i ravnoteže; Detekcija međuprodukta u enzimski kataliziranoj reakciji; Ireverzibilna inhibicija; Alosteričke interakcije (pozitivna i negativna kooperativnost, Hill-ova jednačba); Stereokemija enzimskih reakcija; Komplementarnost enzima i supstrata te korištenje energije vezanja u katalizi; Specifičnost enzimске katalize (ograničenja u enzimskim reakcijama, mehanizmi popravljanja); Izabrani primjeri enzimski kataliziranih reakcija

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Detaljno upoznavanje s mehanizmima i kinetikom enzimski kataliziranih reakcija, te sa specifičnošću i regulacijom enzimskih reakcija.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, konsultacije, seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- D. L. Nelson, M. M. Cox, Lehninger principles of biochemistry, W. H. Freeman & Co., 6th ed. New York, 2013.
- Fersht, Structure and Mechanism in Protein Science: A Guide to Enzyme Catalysis and Protein Folding, W. E. Freeman and Company, New York, 1999.
- Cornish-Bowden, Fundamentals of Enzyme Kinetics, Portland Press, London, 2004.
- H. Segel, Enzyme Kinetics : Behavior and Analysis of Rapid Equilibrium and Steady-State Enzyme Systems, Wiley Classics Library Edition, 1993

DOPUNSKA LITERATURA

- revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 8 bodova

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

306: STRUKTURA I FUNKCIJA MEMBRANA I STANIČNIH ZIDOVA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr.sc. Tihana Žanić-Grubišić, redovita profesorica Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Dinamika i struktura bioloških membrana: dinamika, struktura i organizacija membrane, sastav membranskih lipida, membranski proteini. *Membranski proteini:* tipovi membranskih proteina, integralni proteini, periferni proteini, oblici vezanja perifernih proteina, sinteza, organizacija i transport lipida s obzirom na asimetričnost lipida u membrani. *Ugljikohidrati iz plazmatskih membrana:* ugljikohidrati i selektini, modifikacija ugljikohidrata u Golgijevom aparatu, svrha glikozilacije, specifična glikozilacija lizosomalnih enzima - bolesti vezane uz pogrešnu glikozilaciju, eritrocitarna membrana, spektrin, citoskelet, anionski kanal - protein band-3, ABO antigeni, strukture A, B i H antigena. *Transport malih molekula preko stanične membrane:* tipovi transporta kroz biološke membrane, gradijenti i sile u transportu, proteini nosači, proteinski kanali, kontrola otvaranja i zatvaranja pukotinskog spoja, acetilkolinški receptor, građa Na⁺ kanala, građa K⁺ kanala, tri tipa transporta putem nosača, ciklus djelovanja Na⁺ / K⁺ ATPaze, transportne ATPaze, MDR – višenamjenski transporter za lijekove. *Različite obitelji transportnih proteina:* različite obitelji transportnih proteina, transport Ca²⁺, transport glukoze, mehanizam transporta, kinetika Na⁺ / glukoza ko-transporta, asimetričnost distribucije transportera. *Specifični proteini intracelularnih organela:* mehanizmi nastajanja membrana intracelularnih organela, proteini porijeklom iz citosola, proteini i peptidi specifični za jezgru, mitohondrije, peroksisome i membrane endoplazmatskog retikuluma. *Transport vode preko stanične membrane:* tipovi transporta, pojam osmotskog tlaka, vrste stanica u bubregu, akvaporini. *Stanične stijenke bakterija - struktura i biološka aktivnost:* stanične stijenke Gram-pozitivnih i Gram-negativnih bakterija. Endotoksini - primarna struktura i biološka aktivnost. Peptidoglikan - primarna struktura, enzimski razgradnja, biološka svojstva i utjecaj na imunostni sustav. *Umjetne membrane:* liposomi kao model sustavi lipidnog dvosloja. Priprava, značajke i mogućnost primjene u biologiji i medicini. ISCOMS (imunostimulacijski kompleksi).

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Razumijevanje strukture i funkcije membrana i staničnih zidova

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, konsultacije, seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- D. Voet, J. G. Voet, BIOCHEMISTRY 4th ed., J. Wiley & Sons, New York 2011.
- J. M. Berg, J. L. Tymoczko, L. Stryer, BIOCHEMISTRY 7th ed., W. H. Freeman & Co., New York 2012.
- B. Alberts, A. Johnson, J. Lewis, M. Raff, K. Roberts, P. Walter, MOLECULAR BIOLOGY OF THE CELL 4th ed., Garland Publishing, Inc., New York 2002.
- Alberts, D. Bray, J. Lewis, M. Raff, K. Roberts, J.D. Watson: Molecular Biology of the Cell. 5th. izd, Garland Publ., New York 2008.
- Ferramosca A, Zara V: Biogenesis of mitochondrial carrier proteins: molecular mechanisms of import into mitochondria. Biochim Biophys Acta. 2013 Mar;1833(3):494-502. Review.

DOPUNSKA LITERATURA

- revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 8 bodova

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

351: MAKROMOLEKULSKA KRISTALOGRAFIJA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr.sc. Marija Luić, naslovna redovita profesorica, znanstvena savjetnica, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Metode mikrokristalizacije: metoda strujanja para, metode postavljanja klica (seeding), upotreba robota za kristalizaciju, kristalizacijske farme.

Sakupljanje eksperimentalnih podataka: osnovni dijelovi rendgenskog difraktometra (izvori zračenja, sinhrotroni, detektori), karakteristike zračenja koje se upotrebljava za snimanje, evaluacija dobivenih refleksa (određivanje simetrije tj. prostorne grupe kristala, intenziteti – uvođenje pojma strukturnog faktora). Problem faza u kristalografiji: načina rješavanja tog problema: izomorfna zamjena (SIR, MIR), selenometionski proteini, molekulska zamjena, anomalno raspršenje (SAD, MAD). Računanje mapa elektronske gustoće i utočnjavanje: nekristalografska simetrija, temperaturni faktor, točnost konačnog modela (R-faktor).

Osnove vremenski razlučene kristalografije: uvođenje vremena kao 4. dimenzije i studij dinamičkih promjena u tijeku same reakcije (osnovne metode: “pump – probe” (izazovi pa izmjeri) i “diffusion - trapping” (difuzija pa hvatanje intermedijera).

FEL tehnologija i otvaranje potpuno nove srancie u istraživanju bioloških makromolekula.

Upoznavanje s bazama kristalnih struktura malih molekula (CSD) i proteina (PDB), te načinom njihovog korištenja.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Temeljna znanja iz kristalizacije bioloških makromolekula i rendgenske strukturne analize

OBlici PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, konsultacije, seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- B. RUPP – Biomacromolecular crystallography: principles, practice and applications to structural biology. Abingdon, New York: Garland Science, Taylor & Francis Group, 2010.
- Li-Ling Ooi – Principles of X-ray Crystallography, , Oxford university press, 2010
- McPHERSON – Introduction to macromolecular crystallography, Wiley-Liss, 2003
- A. McPherson: Introduction to Macromolecular Crystallography, Wiley-Liss, Hoboken, New Jersey 2003
- D. BLOW – Outline of crystallography for biologist, Oxford university press, 2002
- A.M. Lesk: Introduction to protein architecture, Oxford University Press, Oxford 2001.
- C.V. Carter, Jr., R.M. Sweet (ur.): Methods in Enzymology, Macromolecular Crystallography, Part A, Academic Press, New York 1997.
- J. DRENTH – Principles of protein X-ray crystallography, Springer-Verlag, 1994
- D.E. McRee: Practical Protein Crystallography, Academic Press, New York 1993.
- J.R. Helliwell: Macromolecular Crystallography with Synchrotron Radiation, Cambridge University Press, Cambridge 1992.
- C. Branden, J. Tooze: Introduction to Protein Structure, Garland, New York 1991.

DOPUNSKA LITERATURA

- revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5 bodova

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

353: GLIKOPROTEINI – STRUKTURA I FUNKCIJA

AUTOR PROGRAMA: dr.sc. Vladimir Mrša, redoviti profesor, Prehrambeno-biotehnološki fakultet, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Struktura glikoproteina. *O*- i *N*-glikozidna veza u proteinima. Struktura *O*-glikozidno vezanih ugljikohidratnih lanaca. Struktura *N*-glikozidno vezanih ugljikohidratnih lanaca. Biosinteza *O*-glikozidno vezanih ugljikohidratnih lanaca. Biosinteza *N*-glikozidno vezanih ugljikohidratnih lanaca. Kontrola glikozilacije proteina. Važnost i uloga glikozilacije proteina. Reverzibilna glikozilacija.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Proširivanje znanja o glikoproteinima.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, konsultacije, seminari

- **POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA**
- B.Alberts, A. Johnson, J. Lewis, M. Raff, K. Roberts, P. Walter, Molecular biology of the cell 4th ed., Garland Publishing, Inc., New York 2002.
- T.W. Rademacher, R.B. Parekh, R.A. Dwek: Glycobiology, u: Ann. Rev. Biochem. 57 (1988) 785.
- N. Sharon, Trends Biochem. Sci. 9 (1984) 198.
- T.L. Doering, W.J. Masterson, G.W. Hart, P.T. Englund, J. Biol. Chem. 265 (1990) 611.
- M. Genzsch, W. Tanner, EMBO J., 15 (1996) 5752-5759.
- H. Nothhaft, C. M. Szymanski, Nature Rev. Microbiol. 8 (2010) 765-778.
- K. Mariño, J. Bones, J. J. Kattla, P. M. Rudd, Nature Chem. Biol. Rev. 6 (2010) 713-723.

DOPUNSKA LITERATURA

- revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5 bodova

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

354: BIOTRANSFORMACIJA LIJEKOVA I KSENOBIOTIKA

AUTOR PROGRAMA: dr.sc. Ruža Frkanec, znanstvena savjetnica, Centar za istraživanje i prijenos znanja u biotehnologiji, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Transformacije lijekova i organizmu stranih tvari (ksenobiotika) u ljudskom organizmu. Usporedbe s biotransformacijom (metabolizmom) endogenih supstancija. Upoznavanje s reakcijama prve faze biotransformacija (oksidacija, redukcija i hidroliza) i enzimskim sustavima koji u njima sudjeluju (dehidrogenaze, monoaminooksidaze, ksantin-oksidaze, citokrom P-450, esteraze i amidaze). Reakcije druge faze biotransformacija: acetilacija (N-acetiltransferaze), metilacija (metiltransferaze), konjugacija s glukuronskom kiselinom (UDP-glukuroniltransferaze), sulfokonjugacija (sulfotransferaze), konjugacija s glutationom (glutation-transferaze). Primjeri biotransformacije lijekova, ksenobiotika i endogenih supstancija za svaku skupinu reakcija. Odnos kemijske strukture, biološke aktivnosti i puta biotransformacije. Genetički polimorfizam u pojedinim skupinama enzima. Urođene bolesti zbog nedostatka specifičnog enzima. Mehanizam stvaranja toksičnih metabolita. Višestruka otpornost na lijekove ("multiple drug resistance"). Metabolomika, moderne analitičke metode za identifikaciju metabolite u organizmu (LC/MS).

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: specifična znanja o biotransformaciji lijekova i ksenobiotika

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, konsultacije, seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- J.G. Hardman, L.E. Limbird, A.G. Gilman (Eds.): The Pharmacological Basis of Therapeutics, 10th Edition, McGraw-Hill, New York 2001.
- M. Coleman: Human Drug Metabolism. John Wiley & Sons, 2005.
- D. Maysinger, T. Žanić-Grubišić: Kemijske osnove biotransformacije lijekova, Školska knjiga, Zagreb 1989.
- A.Y.H. Lu: Individual Variability in Drug Therapy and Drug Safety, .Drug Metab. Dispos. 1998; 26: 1217-1222.
- M. Ingelman-Sundberg: Pharmacogenetics of cytochrome P450 and its applications in drug therapy: The past, present and future. Trends Pharmacol. Sci. 2004; 25 (4): 193-200.

DOPUNSKA LITERATURA

- revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5 bodova

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

355: BIOKEMIJA I PATOBIOKEMIJA LIPIDA I LIPOPROTEINA

AUTOR PROGRAMA: dr. sc. Saša Frank, Associate Professor, Institute of Molecular Biology and Biochemistry, Center of Molecular Medicine, Medical University of Graz, Austrija

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Biokemijska i biofizikalna svojstva lipidnih molekula: trigliceridi, masne kiseline, kolesterol, kolesterol ester, fosfolipidi. *Lipoproteini:* kemijski sastav (lipidi), apoproteini, klasifikacija (hilomikroni, VLDL, LDL, IDL, HDL), biofizikalne osobine pojedinih klasa. *Biogeneza i metabolizam lipoproteina bogatih trigliceridima:* hilomikroni, VLDL, uloga lipoproteinske lipaze (LPL) u metabolizmu hilomikrona i VLDL-a, LPL knock-out (KO) miševi (model za humanu hiperlipoproteinemiju tip I (nedostatak LPL-a), Zašto je nedostatak LPL-a letalan za miševе a ne za ljude? Kako smo genskom terapijom rekombinantnim adenovirusom provedenom na novorođenim miševima uspjeli dobiti 15 LPL-KO miševa?) *Biogeneza i metabolizam LDL-a:* put LDL-a u organizmu, LDL – receptor, molekularni mehanizmi regulacije sinteze LDL-receptora i kolesterola, familijarna hiperkolesterolemija (uzroci - mutacije u LDL-receptoru, *gain of function* mutacije u protein-konvertazi PCSK9, liječenje (inhibitorima sinteze kolesterola (statini): molekularni mehanizam, LDL aferezom, genskom terapijom, novim lijekovima (u fazi kliničkih studija) - Lomitapide – inhibitor sinteze VLDL-a, Mipomersen – antisense oligonukleotid specifičan za apoB-100); *HDL – medijator reverznog transporta kolesterola (RTK):* prvi korak RTK - nastanak diskoidalnog, nascentnog HDL-a (ABCA-1 i ABCG-1), drugi korak RTK - sazrijevanje HDL-a (SR-BI, LCAT, CETP), treći korak RTK - otpuštanje nakupljenog kolesterola u jetri (uloga SR-BI), nadbubrežnoj žlijezdi i spolnim žlijezdama). *Patogeneza ateroskleroze:* uloga LDL-a, HDL-a, makrofaga, primjena sintetskog HDL-a u tretmanu oboljelih od ateroskleroze. *Endotelna lipaza (EL) – modulator kolicine, strukture i funkcije HDL-a:* Kojim eksperimentalnim pristupima smo pronašli da su fosfolipidi u HDL-u glavni supstrat za EL? Metode kojima možemo istražiti molekularni mehanizam cijepanja fosfolipida u HDL-u endotelnom lipazom. Kako ispitati strukturalna i funkcionalna svojstva HDL-a tretiranog endotelnom lipazom?

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Usvajanje i nadopuna znanja o lipidima i lipoproteinima, s težištem na patobiokemiji.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, konsultacije, seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- Lipoproteins: role in health and diseases (on-line free access book), Edited by S. Frank and G. Kostner <http://www.intechopen.com/books/lipoproteins-role-in-health-and-diseases>
- E.M. de Goma and D.J. Rader. Novel HDL-directed pharmacotherapeutic strategies. *Nat.Rev.Cardiol.* 2011; 2:1-12.
- P. Libby. Inflammation in Atherosclerosis. *Arterioscler.Thromb.Vasc.Biol.* 2012;32:2045-2051.
- J.F. Oram and J.W. Heinecke. ATP-Binding Cassette Transporter A1: A Cell Cholesterol Exporter That Protects Against cardiovascular Disease. *Physiol.Rev.* 2005; 85: 1343-1372.
- A.J. Luis. Atherosclerosis. *Nature* 2000; 407: 233-241.
- J.L. Goldstein and M.S. Brown. The LDL Receptor. *Arterioscler.Thromb.Vasc.Biol.* 2009; 29:431-438.

DOPUNSKA LITERATURA

- revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5 bodova

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

357: IMUNOKEMIJA I IMUNOKEMIJSKE METODE

AUTOR PROGRAMA: Dr.sc. Branka Vranešić, znanstvena savjetnica u mirovini, Imunološki zavod i dr.sc. Ruža Frkanec, znanstvena savjetnica, Centar za istraživanje i prijenos znanja u biotehnologiji, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Osnovne definicije pojmova i interakcije antigen-antitijelo (struktura, vezna mjesta, afinitet, avidnost). Imunizacija (imunogeni, hapteni, vezanje haptena na nosače, primarni i sekundarni odziv). Imunoanalitičke tehnike: reakcije precipitacije u tankom sloju (jednosmjerna i dvosmjerna imunodifuzija, imunoelektroforeza) i u otopini (nefelometrija, turbidimetrija). Reakcije aglutinacije. Reakcije imunoprecipitacije. Immunoblotting. Imunotestovi - kompetitivni i nekompetitivni (radioimunotest, enzimimunotest, testovi bazirani na kemiluminescenciji i fluorescenciji). Standardizacija imunotestova - standardi za imunobiološke preparate, određivanje preciznosti, osjetljivosti, reproducibilnosti. Pokazne i individualne laboratorijske vježbe.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Stjecanje specifičnih znanja o imunokemijskim metodama neophodnim za istraživački rad.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, konsultacije, seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- Coico, Sunshine, Benjamini: Immunology - a Short Course, 5. izd., Wiley, New York 2003.
- M. Roitt, J. Brostoff, D. Male: Immunology, 6.izd., Mosby, St.Louis 2001.
- T. Chard: An Introduction to Radioimmunoassay and Related Techniques, Elsevier, Amsterdam 1990.
- P. Tijssen: Practice and Theory of Enzyme Immunoassays, Elsevier, Amsterdam 1993.
- E. Harlow, D. Lane: Antibodies. A Laboratory Manual, Cold Spring Harbor Laboratory, 1988.
- E. D. Day: Advanced Immunochemistry, 2. izd., Wiley-Liss, New York 1990.
- N.C. Price (ur.): Proteins, The Labfax series, BIOS Scientific Publishers, Academic Press, New York 1996.
- R. Edwards (ur.): Immunoassays, Essential Data, Wiley, New York 1996.
- E. P. Diamondis, T. K. Christopoulos (ur.): Immunoassay, Academic Press, San Diego 1996.
- J.P. Gosling: Immunoassays: A Practical Approach (The Practical Approach Series), Oxford University Press, USA, 2000.
- R.A. Goldsby, T.J. Kindt, B.A. Osborne: Kuby Immunology, 4.izd., W.H. Freeman and Company, New York 2000.
- C.A. Janeway, P. Travers, M. Walport, M. Schlomchik: Immunobiology 5, Garland Publishing, New York, 2001.
- Imunologija (I. Andreis, D. Batinić, F. Čulo, D. Grčević, M. Marušić, M. Taradi, D. Višnjić), 6.izd., Medicinska naklada, Zagreb, 2004.

DOPUNSKA LITERATURA

- revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5 bodova

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

358: MODELIRANJE BIOMAKROMOLEKULA: STRUKTURE, KOMPLEKSI, INTERAKCIJE

AUTOR PROGRAMA: dr.sc. Sanja Tomić, znanstvena savjetnica, naslovna redovita profesorica, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Računalo je postalo nezaobilazno u gotovo svim znanstvenim istraživanjima i omjer virtualnih (*in silicio*) istraživanja u odnosu na laboratorijska neprestano je u porastu. Biološku molekulu i/ili lijek moguće je ciljano mijenjati, odnosno dizajnirati, samo u slučaju kada je točno poznato kako djeluje, kako se transportira, te što su posljedice djelovanja. Pomoću računala, odnosno odgovarajućih računalskih programa, modeliramo receptore, ligande, komplekse i njihovu rasprostranjenost. Molekulske modeliranje pomaže nam u razumijevanju bioloških procesa. Kvantitativno razumijevanje biološke aktivnosti, pored molekuskog modeliranja uključuje i odgovarajuće statističke tehnike koje nam pomažu u nalaženju veze između ogromnog broja fizikalnih i kemijskih, o strukturi ovisnih, veličina i aktivnosti. Takva istraživanja, u sprezi s eksperimentom koji nam pruža povratnu informaciju, omogućuju promišljeno (re)dizajniranje liganda, ali i receptora. Moguće primjene takvih istraživanja su u biotehnologiji i medicini.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Sticanje znanja o modeliranju biomakromolekula.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, konsultacije, seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA

- K.B. Lipkowitz, D.B. Boyd (Eds.): Reviews in Computational Chemistry, Indiana University-Purdue University of Indianapolis (IUPUI), Vols 3-5.
- A Andrew R. Leach 'Molecular Modelling: Principles and Applications', Addison Wesley Longman 1996
- W.F. van Gunsteren, P.K. Weiner, A.J. Wilkinson (Eds.): Computer Simulation of Biomolecular Systems, Vols 2-3, ESCOM, Dordrecht 1993. i 1997.
- W.F. van Gunsteren, G. Klebe, H. Kubinyi: 3D QSAR Methods in Drug Design, ESCOM, Dordrecht 1993.
- K. Gundertofte, F.S. Jorgensen (Eds.): Molecular Modeling and Prediction of Bioactivity, Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York 2000.
- H.-D. Höltje, W. Sippl (Eds.): Rational Approaches to Drug Design, Prous Science, Barcelona-Philadelphia 2001.
- R. Carbo-Dorca, D. Robert, L. Amat, X. Girones, E. Besalu (Eds.): Molecular Quantum Similarity in QSAR and Drug Design, Springer Verlag, Berlin-Heidelberg-New York 2001

DOPUNSKA LITERATURA

- revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5 bodova

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

381: ODABRANA POGLAVLJA BIOKEMIJE

AUTOR(I) PROGRAMA: Gostujući nastavnik

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA: ovisno o programu kolegija

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: specifična znanja iz biokemije

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: ovisno o programu kolegija

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA: ovisno o programu kolegija

DOPUNSKA LITERATURA: revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

Smjer: FIZIKALNA KEMIJA (FK)**400: KEMOMETRIKA**

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Vladislav Tomišić, redoviti profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu; dr. sc. Tomica Hrenar, izvanredni profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

• OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Repetitorij elementarne statistike: osnove teorije vjerojatnosti, najčešće univarijatne i multivarijatne raspodjele, lokacijski i disperzijski statistički testovi.

Analiza varijancije: jednosmjerna, višesmjerna (fiksni učinak, sa i bez ponavljanja).

Regresijska analiza (metoda najmanjih kvadrata): linearni modeli (testovi značajnosti regresijskih parametara, vagani modeli, test skladnosti). Nelinearni modeli (osnovna načela i metode).

Optimizacija nacrta pokusa: metoda politopa (simpleksa).

Izgladivanje i filtriranje podataka.

Rojna (*cluster*) analiza.

Analiza glavnih komponenata (PCA), PCR, PLS, faktorska analiza.

Linearno programiranje.

QSAR.

Neparametarska statistika: lokacijski i korelacijski testovi, analiza varijancije, usporedba raspodjela.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Uvođenje u kompetentni, samostalni znanstveni rad.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, konsultacije i seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

D. L. Massart, B. G. M. Vandeginste, L. M. C. Buydens, S. de Jong, P. J. Lewi, J. Smeyers-Verbeke: *Handbook of Chemometrics and Qualimetrics, Part A*, Elsevier, Amsterdam 1997.

B. G. M. Vandeginste, D. L. Massart, L. M. C. Buydens, S. de Jong, P. J. Lewi, J. Smeyers-Verbeke: *Handbook of Chemometrics and Qualimetrics, Part B*, Elsevier, Amsterdam 1998.

N. R. Draper, H. Smith: *Applied Regression Analysis*, Wiley, New York 1976. (1. izd.), 1981. (2. izd.).

• B. E. Cooper, *Statistics for Experimentalists*, Pergamon Press, Oxford 1969.

W. R. Dillon, M. Goldstein: *Multivariate Analysis □□ Methods and Applications*, Wiley, New York 1984.

D. L. Massart, B. G. M. Vandeginste, S. N. Deming, Y. Michotte, L. Kaufman: *Chemometrics: A Textbook*, Elsevier, Amsterdam 1988.

S. N. Deming, S. L. Morgan: *Experimental Design: A Chemometric Approach*, Elsevier, Amsterdam 1987.

I. Pavlić, *Statistička teorija i primjena*, 4. izd., Tehnička knjiga, Zagreb 1988.

• W. H. Press, B. P. Flannery S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling: *Numerical Recipes*, Cambridge University Press, Cambridge 1986. (i kasnija izdanja).

DOPUNSKA LITERATURA : revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

401: ODABRANA POGLAVLJA KVANTNE KEMIJE

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Ivan Ljubić, znanstveni suradnik, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Pregled modernih računalnih kvantno-kemijskih metoda. Hartree-Fockova (HF) teorija samousklađenog polja (SCF) za zatvorene i otvorene elektronske ljuske (restriktivni i nerestriktivni formalizam). Pojam i opis dinamičke elektronske korelacije i pregled jednoreferentnih (post-HF) pristupa. Osnovni pojmovi druge kvantizacije. Pojam i opis statičke elektronske korelacije. Multikonfiguracijske metode u kvantnoj kemiji (MCSCF, CASSCF). Multireferentna CASPT2 metoda. Teorija funkcionala elektronske gustoće (DFT). Vremenski ovisan DFT formalizam (TD-DFT). Problemi točnosti i kalibracije u računalnoj kvantnoj kemiji. Semiklasična dinamika na kvantno-kemijskim plohama potencijalne energije. Varijacijska teorija prijelaznog stanja. Metoda quasi-klasičnih trajektorija.

Primjeri iz prakse: modeliranje mehanizma i kinetike reakcija u plinskoj fazi, otopinama i čvrstoj fazi; modeliranje IR, UV i XPS spektroskopskih svojstava; neadijabatska fotodinamika modelnih peptida; usporedba jednoreferentnih, multireferentnih i DFT pristupa.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Uvođenje u kompetentni, samostalni znanstveni rad.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, konzultacije i seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

1. P. Atkins i R. Friedman, Molecular Quantum Mechanics, Oxford University Press, Oxford, 2005.
2. B.O. Roos i P.-O. Widmark (ur.), European Summerschool in Quantum Chemistry, Books 1-3, Lund University, 2003.
3. T. Helgaker, P. Jørgensen, J. Olsen, Molecular Electronic Structure Theory, John Wiley & Sons, Chichester, England, 2012.
4. G. Truhlar, A. D. Isaacson i B. C. Garrett, Generalized Transition State Theory u M. Baer (ur) Theory of Chemical Reaction Dynamics, CRC Press, Boca Raton, FL, 1985.

DOPUNSKA LITERATURA: revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 8

NAČIN POLAGANJA ISPITA: usmeno ili seminarski rad

402: MOLEKULSKA SPEKTROSKOPIJA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Tomica Hrenar, izvanredni profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Međudjelovanje zračenja i molekula, oblik linija u spektru. Eksperimentalne spektroskopske metode. *Rotacijska spektroskopija:* Model krutog rotora i odstupanja; Starkov efekt; Hiperfino cijepanje; Određivanje strukture molekula; Studij van der Waalsovih molekula. *Vibracijska spektroskopija:* Normalni načini vibriranja; Rotacijska struktura vrpce; Gibanja velikih amplituda. *Elektronska spektroskopija:* Sprezanja impulsnih momenata kod atoma i molekula; Stanja višeatomnih molekula; Vibracijska struktura; Renner-Tellerov efekt; Jahn-Tellerov efekt; Rotacijska struktura vrpce. Fotoelektronska spektroskopija. *Laseri i laserska spektroskopija:* Tipovi lasera i načela njihova rada. Rezonancijska Ramanova spektroskopija; Koherentna Ramanova raspršenja; Laserska magnetska rezonancija; Spektroskopija zasićenja; Laserski inducirana fluorescencija; Višefotonska apsorpcija.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Uvođenje u kompetentni, samostalni znanstveni rad.

OBlici PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, konsultacije i seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

- J. M. Hollas: *Modern Spectroscopy*, Wiley, New York 1991.
- G. Herzberg: *Molecular Spectra and Molecular Structure, I. Spectra of Diatomic Molecules*, Van Nostrand, New York 1950.
- G. Herzberg: *Molecular Spectra and Molecular Structure, II. Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules*, Van Nostrand, New York 1950.
- G. Herzberg: *Molecular Spectra and Molecular Structure, III. Electronic Spectra and Electronic Structure of Polyatomic Molecules*, Van Nostrand, New York 1966.
- P. F. Bernath: *Spectra of Atoms and Molecules*, Oxford University Press, Oxford 1995.
- J. M. Hollas: *High Resolution Spectroscopy*, 2. izd., Wiley, New York 1998.
- E. Hirota, R. W. Field, J.P. Maier, S. Tsuchiya (ur.): *Nonlinear spectroscopy for molecular structure determination*, Blackwell Science, Oxford 1998.

DOPUNSKA LITERATURA: revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 8

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

403: STATISTIČKA TERMODINAMIKA I NEPOVRATIVI PROCESI

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Vladislav Tomišić, redoviti profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

• OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Teorijska fenomenološka termodinamika: Matematički i fizikalni temelji (Pfaffove forme, homogene funkcije, jakobiane, karakteristične funkcije). Aksiomatika (Carathéodory-evo načelo). Relativističko poopćenje. *Teorijska statistička termodinamika:* Teorija vjerojatnosti. Kvantno_mehanička osnovica. Stacionarni model (metoda ansambla). Klasično približenje, metoda particijske funkcije. Prosudba stacionarnog modela, matrica gustoće. Teorija fluktuacije. Pregled primjena metode molekulske particijske funkcije. Modeli zasnovani na kanonskom ansamblu: Debye-ov kristal, realni plinovi, elektrolitne otopine (P. Debye i E. Hückel, J. E. Mayer, metode Monte Carlo i molekulske dinamike). *Nepovrativi procesi:* Poopćeni protoci i sile, linearne fenomenološke relacije (Onsager). Nelinearne pojave (disipativne strukture, oscilirajuće kemijske reakcije). *Termokemija:* Termometrija. Kalorimetrija. Standardne termodinamičke veličine. Ustroj termodinamičkih tablica, najpoznatije tabulacije. *Vježbe:* seminari.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Uvođenje u kompetentni, samostalni znanstveni rad.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, konsultacije i seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

- E. A. Guggenheim: Thermodynamics, 5. izd. North-Holland, Amsterdam 1967.
- H. Margenau, G. M. Murphy: The Mathematics of Physics and Chemistry, Vol. I, Van Nostrand, New York 1956. (pogl. 1, 11, 12), Vol. II, Van Nostrand, New York 1964. (pogl. 8).
- M. L. McGlashan: Chemical Thermodynamics, Academic Press, London 1979.
- G. Nicolis, I. Prigogine: Self_organization in Non_equilibrium Systems, Wiley, New York 1977; (ruski prijevod: Samoorganizacija v neravnovesnyh sistemah, Mir, Moskva 1979).
- Vl. Simeon: Termodinamika, Školska knjiga, Zagreb 1980.
- J. R. Waldram: The Theory of Thermodynamics, Cambridge University Press, Cambridge 1985.
- J. O. M. Bockris, A. K. N. Reddy: Modern Electrochemistry, 2. izd., Vol. 1, Plenum Press, New York 1998.

DOPUNSKA LITERATURA : revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 8

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

404: KEMIJSKA KINETIKA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Mladen Biruš, redoviti profesor u mirovini, Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Sveučilište u Zagrebu

• **OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:**

Uvod. Empirijska analiza reakcijskih brzina. Eksperimentalne metode. Bimolekulske reakcije u plinskoj fazi. Monomolekularni raspad u plinskoj fazi. Kemijske reakcije u molekularnoj struji. Prijenos energije pri kemijskoj reakciji. Kinetika reakcija u otopinama. Brze reakcije u otopinama. Relaksacijska kinetika. Enzimski kinetika. Reakcije u međusloju. Uvod u nelinearnu kinetiku. Vježbe i seminari: Brze reakcije: kinetika sa zaustavljenim tokom, kinetika iz proširenja spektralne linije.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Uvođenje u kompetentni, samostalni znanstveni rad.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: predavanja, konsultacije i seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

- J. W. Moore, R. G. Pearson: Kinetic and Mechanism, Wiley, New York 1982.
- K. J. Laidler: Chemical Kinetics, McGraw-Hill, New York 1960.
- W. C. Gardiner, Jr.: Rates and Mechanisms of Chemical Reactions, Benjamin, Menlo Park 1972.
- C. F. Bernasconi: Investigation of Rates and Mechanisms of Reactions, 4. izd., Wiley, New York 1986.
- J. Sandström: Dynamic NMR Spectroscopy, Academic Press, London 1984.

DOPUNSKA LITERATURA : revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 8

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

405: ODABRANA POGLAVLJA ELEKTROKEMIJE

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Mirjana Metikoš-Huković, profesor emeritus, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Struktura međufaznih granica: termodinamika elektrificirane granice faza, izlazni rad, Fermijeva razina, potencijali, međufaze kovina/elektrolit i poluvodič/elektrolit. *Elektrodna kinetika:* brzina-potencijal odnosi, kinetika linearne promjene potencijala, ireverzibilne i reverzibilne reakcije, red reakcije, utjecaj strukture međufazne granice na elektrodnu kinetiku, određivanje mehanizma elektrokemijske reakcije. *Kvantni pristup elektrokemiji:* kvantno-mehanička formulacija struje izmjene (brzine elektrokemijske reakcije), kvantno-mehanički model elektrokemijske reakcije izlučivanja vodika, stohastička teorija prijelaza elektrona. *Stabilnost materijala i elektrokristalizacija:* elektrokemijska kinetika kao osnovica korozijskih reakcija, mehanizmi korozijskih reakcija, metode istraživanja i metodologija zaštite materijala od korozije; modificiranje površine organskim aditivima, organskim filmovima (samoorganizirajući monoslojevi), oksidni-pasivni filmovi nanometarske debljine. Kinetika oblikovanja monosloja, razvoj teorije elektrokristalizacije, elektrodepozicija, elektrokemijski pristup nanotehnologiji. *Elektrokataliza:* funkcionalni materijali, elektrokataliza na molekulskom nivou. *Elektrokemijska konverzija energije i elektrokemija čistog okoliša:* vodikova energija, gorivni članci, djelotvornost konverzije svjetlosne energije u električnu, elektrokemijsko pročišćavanje industrijskih otpadnih voda. *Eksperimentalne tehnike:* stacionarne i nestacionarne elektrokemijske tehnike, elektrokemijska impedancijska spektroskopija.

Vježbe (laboratorijske): Impedancija elektrokemijskog članka. Elektrokatalitičko izlučivanje H₂, redukcija O₂. Fotoelektrokemijska konverzija energije. Elektrokatalitička oksidacija metanola. Zaštita materijala od korozije dorodom korozivne sredine. Specifični oblici korozije materijala.

Sinteza (mehanizam i kinetika) i karakterizacija samoorganizirajućih organskih filmova na vodljivom supstratu. Prijenos naboja – tuneliranje kroz tanku barijeru.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Uvođenje u kompetentni, samostalni znanstveni rad.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, konsultacije i seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

1. J.O.M. Bockris, A.K.N. Reddy, M. Gamboa-Aldeco: Modern Electrochemistry 2A, Kluwer Academic Publishers/Plenum Publishers, N.Y. 2000.
2. A.J. Bard, L.R. Faulkner: Electrochemical Methods; Fundamentals and Applications, 2. izd., John Wiley & Sons, Hoboken 2001.
3. A. Wieckowski: Interfacial Electrochemistry; Theory, Experiment, and Applications, M. Dekker, New York 1999.
4. Southampton Electrochemistry Group: Instrumental Methods in Electrochemistry; Horwood, Westergate 2001.
5. K. Kordesch, G. Simader: Fuel Cell and Their Applications, VCH Publisher, New York 1996.
6. A.J. Bard: Integrated Chemical Systems; A Chemical Approach to Nanotechnology, John Wiley & Sons, New York 1994.
7. P. Marcus, J. Oudar (ur.): Corrosion Mechanisms in Theory and Practice, M. Dekker, New York 1995.

DOPUNSKA LITERATURA: revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

451: ODABRANA POGLAVLJA POVRŠINSKE I KOLOIDNE KEMIJE

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Tajana Preočanin, izvanredna profesorica, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, dr. sc. Svetozar Musić, znanstveni savjetnik u mirovini, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Površinsko kompleksiranje. Mehanizam i ravnoteža površinskih reakcija (modeli 1pK, 2pK i MUSIC). Asocijacija protuiona. Specifična adsorpcija. Eksperimentalne metode za karakterizaciju površinskog naboja (potenciometrija, elektrokinetika) i interpretacija mjernih podataka. Mikroemulzije: nastajanje, električna vodljivost. Agregacija i adhezija koloidnih čestica. Kinetika. Osnove i primjena Mössbauerove spektroskopije. Nastajanje čvrste faze. Veličina kristalita. Polimorfne transformacije. Feritizacija kovinskih kationa.

Primjena FT-IR i Ramanove spektroskopije za proučavanje specifične adsorpcije. Veličina čestica i kinetika kristalizacije. Osnove Augerove spektroskopije i primjena u analizi površine kovina (oksidacija, korozija).

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA:

Primijeniti modele i teorije fizikalne kemije na koloidne sustave i međupovršine.

Koristiti kemijsku terminologiju, nomenklaturu, jedinice i druge konvencije u području koloidne i međupovršinske kemije

Primijeniti matematičke metode kod opisivanja koloidnog sustava i međupovršina.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, konsultacije i seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

- J. C. Berg: Introduction to Interfaces and Colloids, Word Scientific, New Jersey, 2010.
- D. F. Evans, H. Wennestorm: Colloidal domain, Wiley-VCH, New York, 1999.
- S. Bucak, D. Rende: Colloid and Surface Chemistry, CRC Press, New York, 2014.
- N. Kallay (ur.): Interfacial Dynamics, Marcel Dekker, New York 1999.
- J. Lützenkirchen, Surface Complexation Modelling, Academic Press, Amsterdam, 2006.
- M. Thompson, M. D. Baker, A. Christie, J. F. Tyson: Auger Electron Spectroscopy, Wiley, New York 1995.
- A. Vertes, L. Korecz, K. Burger: Mössbauer Spectroscopy, Elsevier, Amsterdam 1979.
- L. M. Coyne, S. W. S. McKeever, D. F. Blake: Spectroscopic Characterization of Minerals and Their Surfaces, Amer. Chem. Soc., Washington 1990.
- J. Lyklema: Fundamentals of Interface and Colloid Science, Vol. 1 i 2, Academic Press, London 1995.

DOPUNSKA LITERATURA: revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

452: RADIJACIJSKA KEMIJA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Branka Mihaljević, viša znanstvena suradnica, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

• OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

UVOD Prirodni izvori ionizirajućih zračenja u biosferi; radioekologija. Umjetni izvori ionizirajućih zračenja i njihove primjene. Vrste ionizirajućih zračenja. Značaj učinaka ionizirajućih zračenja u osnovnim i primjenjenim znanostima. Predmet i metode nuklearne kemije, radiokemije i radijacijske kemije i odnos prema radiobiologiji. Povijesni pregled razvoja radijacijske kemije.

MEDUDJELOVANJA ZRAČENJA I TVARI Gubitak energije zračenja u tvari. Čestična zračenja: neutroni; električki nabijene čestice: elektroni i ioni. Elektromagnetska zračenja. Gradijent gubitka energije (LET). Apsorpcija energije zračenja u tvari.

OPAŽANJE I MJERENJE UČINAKA ZRAČENJA Detekcija i mjerenje količine apsorbirane energije ionizirajućeg zračenja (dozimetrija zračenja). Vremenski razlučene tehnike opažanja reaktivnih kratkoživećih čestica.

FIZIČKO-KEMIJSKI UČINCI IONIZIRAJUĆIH ZRAČENJA Prostorna i vremenska raspodjela događaja u ozračenoj tvari. Struktura tragova ionizirajućih zračenja. Nastajanje i kemijske reakcije reaktivnih kratkoživećih čestica: elektrona, iona, pobuđenih molekula i slobodnih radikala.

DJELOVANJE ZRAČENJA NA VODU I VODENE OTOPINE Primarni prinosi reaktivnih čestica u radiolizi vode. Utjecaj pH i LET.

DJELOVANJE ZRAČENJA NA BIOLOŠKE MOLEKULE Biološke makromolekule i DNK. Utjecaj doze, brzine doze, sredine, koncentracije, kisika, temperature, LET.

DJELOVANJE ZRAČENJA NA STANICE I JEDNOSTANIČNE ORGANIZME Izravni i neizravni učinci. Teorija mete. Molekulska teorija.

RADIJACIJSKA TEHNOLOGIJA Radijacijska sterilizacija medicinskih proizvoda, ozračivanje namirnica, modifikacija polimera.

DJELOVANJE ZRAČENJA NA BIOLOŠKE SUSTAVE Odnos doze i učinka. Somatski i genetski učinci. Nestohastički i stohastički učinci. Radijacijska epidemiologija. Rizik od ozračivanja.

ELEMENTI ZAŠTITE OD ZRAČENJA Linearna hipoteza. Usporedba rizika. Analiza rizika i dobiti. Sustav ograničenja doza. Načelo ALARA.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Uvođenje u kompetentni, samostalni znanstveni rad.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, konsultacije i seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

- A. Mozumder, Y. Hatano (ur.), Charged Particle and Photon Interactions with Matter. Chemical, Physicochemical, and Biological Consequences with Applications. Marcel Dekker, Inc., 2004.
- C.D. Jonah and B.S.M. Rao (ur.), Radiation Chemistry. Present Status and Future Trends. Elsevier, 2001.
- A. Mozumder, Fundamentals of Radiation Chemistry, Academic Press, 1999.
- J.W.T. Spinks, R.J. Woods, An Introduction to Radiation Chemistry. Wiley, New York, 3. izd., 1990.
- Farhataziz, M.A.J. Rodgers, (ur.), Radiation Chemistry, VCH, Weinheim, 1987.
- Članci iz Tehničke enciklopedije Leksikografskog zavoda Miroslav Krleža:
- V. Paar: Nuklearna fizika, TE 9,448., K. Ilakovac: Radioaktivnost, TE 11, 398., M. Vlatković: Radiokemija i radionuklidi, TE 11, 415., K. Ilakovac: Nuklearno zračenje, TE 9, 535., D. Ražem: Radijacijska kemija, TE 11, 374. D. Ražem: Radijacijska tehnologija, TE 11, 386., M. Turk: Biološko djelovanje nuklearnog zračenja, TE 9, 555.

DOPUNSKA LITERATURA : revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

453: RAVNOTEŽA I KINETIKA PROCESA U HETEROGENIM SUSTAVIMA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Damir Kralj, znanstveni savjetnik, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

• OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Ravnoteže u sustavima čvrsto/tekuće i *prezasićenost*: produkt topljivosti, koncentracije i aktivnosti u prezasićenim otopinama, neke kritične vrijednosti. *Kinetika i mehanizmi procesa*: nastanak čvrste faze iz prezasićenih otopina (nukleacija i rast kristala - klasičan i neklasičan koncept); otapanje. *Svojstva čvrste faze*: oblik kristala i njihova raspodjela po veličini, hidrodinamički čimbenici, kemijska svojstva, taložni dijagrami, utjecaj primjesa. *Sekundarne promjene čvrste faze*: transformacija, koagulacija, aglomeracija. Primjena. Pokazne vježbe.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Uvođenje u kompetentni, samostalni znanstveni rad.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, konsultacije i seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

- A. E. Nielsen: Kinetics of Precipitation, Pergamon Press, Oxford 1964.
- A. G. Walton: The Formation and Properties of Precipitates, Interscience, New York 1967.
- O. Söhnel, J. Garside: Precipitation, Butterworth-Heinemann, Oxford 1992.
- H. Füredi-Milhofer, A. G. Walton: Principles of Precipitation of Fine Particles, u: G. D. Parfitt (ur.): Dispersion of Powders in Liquids, 3. izd., Applied Science Publ., London 1981, str. 203-272.
- A. E. Nielsen: Precipitates: Formation, Coprecipitation and Aging, u: I. M. Kolthoff, P. J. Elving (ur.): Treatise on Analytical Chemistry, 2. izd., Vol. 3, Wiley, New York 1983, str. 269-347.
- B. Težak, Disc. Faraday Soc. 1966, 175; *Croat. Chem. Acta* 40 (1968) 63; 42 (1970) 81.
- A. E. Nielsen, *Croat. Chem. Acta* 42 (1970) 319; *Pure Appl. Chem.* 53 (1981) 2025.
- A. E. Nielsen, M. Toft: *J. Crystal Growth* 67 (1984) 278, 289.
- Lj. Brečević, D. Kralj: Kinetics and Mechanisms of Crystal Growth in Aqueous Systems, u: N. Kallay (ur.): Interfacial Dynamics, Marcel Dekker, New York 1999.
- H. Colfen and M. Antonietti, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2005, 44, 5576 – 5591.
- H. Colfen and S. Mann, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2003, 42, 2350 – 2365.
- D. Gebauer, M. Kellermeier, J.D. Gale, L. Bergstrom and H. Colfen: *Chem. Soc. Rev.*, 2014, 43, 2348—2371.

DOPUNSKA LITERATURA : revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

454: MATEMATIČKA KEMIJA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Nenad Trinajstić, akademik, profesor emeritus, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

• **OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:**

Predstavljanje podataka. Skupovi i djelomično uređeni skupovi. Preslikavanje i grupiranje podataka. Klusteriranje podataka. Neuronske mreže. Ortogonalni polinomi. Fourierova, Walshova, Hadamardova i druge transformacije. Predstavljanje kemijskih struktura. Matrica susjedstva. Matrica udaljenosti. Diskretna matematika u kemiji. Grafovi. Algoritmi na grafovima. Kompleksnost. Teorija informacija u kemiji. Topologija u kemiji. Kiralnost molekula. Simetrija molekula. Krute i fleksibilne molekule. Permutacijsko inverzijske grupe. Molekulska sličnost. Molekulska raznovrsnost. Kombinatorna kemija. Matematičko planiranje kemijske sinteze. Kombinatorno prebrojavanje. Izomeri. Sparivanja. Konjugirani prstenovi. Rekurentno prebrojavanje. Svojstva molekula i njihovo modeliranje topološkim indeksima i drugim deskriptorima. QSAR i QSPR. Raspodjele. Statistika. Korelacije. Faktorska analiza.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Uvođenje u kompetentni, samostalni znanstveni rad.

OBlici PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, konsultacije i seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

- R.E. Merrifield, H.E. Simmons: Topological Methods in Chemistry, Wiley, New York 1989.
- G. Polyá, R.C. Reed: Combinatorial Enumeration of Groups, Graphs, and Chemical Compounds, Springer Verlag, Berlin 1987.
- D. Veljan: Kombinatorika s teorijom grafova, Školska knjiga, Zagreb 1989.
- D. Bishop: Group Theory and Chemistry, Dover Publications, New York 1993.
- R.B. King (ur.): Chemical Applications of Topology and Graph Theory, Elsevier, Amsterdam 1983.
- N. Trinajstić: Chemical Graph Theory, CRC Press, Boca Raton 1983.

DOPUNSKA LITERATURA : revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

456: NANOTEHNOLOGIJE

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Marko Kralj, viši znanstveni suradnik, Institut za fiziku, Zagreb

• OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Razvoj nanotehnologija. Znanost o površinama i tankim slojevima: eksperimentalne metode, elektronske i fotoelektronske spektroskopije, difrakcija niskoenergetskih elektrona, termalna desorpcija, izlazni rad. Manipuliranje pojedinim atomima, tunelirajuće mikroskopije (STM, AFM, MFM). Nano-strukture: od molekularnih i atomskih grozdova do čvrstog tijela, elektronska i magnetska svojstva nano-struktura, primjena, ugljikov “zoološki vrt” (fullereni). Primjene u tehnologiji.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Uvođenje u kompetentni, samostalni znanstveni rad.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, konsultacije i seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

- P.W. Atkins: Physical Chemistry, 6. izd., Oxford University Press, Oxford 1998.
- A. Zangwill: Physics at Surfaces, Cambridge University Press, Cambridge 1989.
- C. J. Chen: Introduction to Scanning Tunneling Microscopy, Oxford University Press, Oxford 1993.
- D. Sarid: Scanning Force Microscopy with Applications to Electric, Magnetic, and Atomic Forces, Oxford University Press, Oxford 1993.
- N. Taniguchi: Nanotechnology, Oxford University Press, Oxford 1996.
- D. Koruga: Fullerene C₆₀: History, Physics, Nanobiology, Nanotechnology, Elsevier Science, Amsterdam 1993.

DOPUNSKA LITERATURA : revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

457: FIZIKALNA KEMIJA MAKROMOLEKULA

AUTOR(I) PROGRAMA: dr. sc. Davor Kovačević, redoviti profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Makromolekule: polimeri, polielektroliti, polisaharidi, proteini; struktura lanca, veličina i oblik makromolekula, konfiguracija lanaca; utjecaj strukture i molarne mase na fizikalno-kemijska svojstva makromolekula.

Statistika polimernog lanca: konformacije polimernih lanaca, polumjer vrtnje, udaljenost krajeva lanaca, gustoća statističkog klupka.

Fizikalna stanja makromolekula: staklasto stanje, fazni prijelazi, teorije staklastog prijelaza

Elektrostatske interakcije u otopinama makromolekula: problem slobodnog volumena, primjena metoda numeričke simulacije.

Metode određivanja molarne mase: osmotski tlak, sedimentacija, viskoznost.

Metode određivanja veličine čestica: raspršenje svjetlosti, raspršenje röntgenskih zraka, raspršenje neutrona, mikroskopske metode i tehnike.

Otopine makromolekula: teorija otopina, termodinamika otopina, topljivost, konformacija, nastajanje polielektrolitnih kompleksa.

Makromolekule na površini: adsorpcija polimera, kinetika adsorpcije, polielektrolitni višeslojevi, polielektrolitne četke.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Uvođenje u kompetentni, samostalni znanstveni rad.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, konsultacije i seminari

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

S. F. Sun: *Physical Chemistry of Macromolecules: Basic Principles and Issues*, 2. izd., Wiley, New York, 2004.

P. C. Hiemenz and T. P. Lodge, *Polymer Chemistry*, 2. izd., CRC Press, Boca Raton, 2007.

A. Y. Grosberg, A. R. Khokhlov: *Giant Molecules*, Academic Press, San Diego, 1997.

T. Radeva (ur.): *Physical Chemistry of Polyelectrolytes*, M. Dekker, New York, 2001.

G. Decher, J. B. Schlenoff, *Multilayer Thin Films*, 2. izd., Wiley-VCH, Weinheim, 2012.

DOPUNSKA LITERATURA: revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

458: TEORIJSKA KEMIJA I REAKCIJSKA DINAMIKA

NAZIV KOLEGIJA: dr. sc. Tomica Hrenar, izvanredni profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu; dr. sc. Nađa Došlić, znanstvena savjetnica, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

AUTOR(I) PROGRAMA: Teorijska kemija i reakcijska dinamika

• **OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:** Uvod: matematički uvod, operatorska algebra, Fourierova transformacija, numeričke i statističke metode, Schrödingerova jednačba, Born-Oppenheimerova aproksimacija. Klasična dinamika: klasične trajektorije, polje sila, raspodjela početnih brzina, uvjeti i ograničenja, ab initio molekulska dinamika, vremenski ovisna svojstva. Kvantna dinamika: vremenski neovisna vibracijska valna funkcija, modelni potencijali: raspršenje i vezana stanja, rješavanje Schrödingerove jednačbe, vremenski razvoj valne funkcije, operator vremenskog razvoja, vremenski razvoj valnih paketa, multikonfiguracijska vremenski ovisna Hartree-jeva metoda. Reakcijska dinamika: molekulska reakcijska dinamika, energija aktivacije, plohe potencijalne energije i kemijske reakcije, vremenski razlučena spektroskopija, neadiabatska dinamika.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Uvođenje u kompetentni, samostalni znanstveni rad.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, konsultacije i seminari.

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA: Suvremena znanstvena literatura

DOPUNSKA LITERATURA :

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad

481: ODABRANA POGLAVLJA FIZIKALNE KEMIJE

AUTOR(I) PROGRAMA: Gostujući nastavnik

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA: ovisno o programu kolegija

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: specifična znanja iz fizikalne kemije

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: ovisno o programu kolegija

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA: ovisno o programu kolegija

DOPUNSKA LITERATURA: revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

Smjer: ANALITIČKA KEMIJA (AK)

501: ATOMSKA SPEKTROMETRIJA U ANALITICI

NASTAVNIK: dr. sc. Sanda Rončević, docentica, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Analiza elemenata atomskim spektrometrijskim metodama, povijesni razvitak, sadašnje stanje, primjena za pojedine elemente. *Priprema uzoraka:* prikupljanje i spremanje uzoraka, odjeljivanje i koncentriranje elemenata prije analize, izvori kontaminacija. *Teorija atomske spektrometrije:* atomska apsorpcija, emisija i fluorescencija. *Atomska apsorpcijska spektrometrija (AAS):* osnovna svojstva instrumenata (vrste, automatizacija, izvori zračenja), kalibracija, atomizacija u plamenu, elektrotermička atomizacija, korekcija pozadine, posebne tehnike (tehnika razvijanja hladnih para, hidridna tehnika, apsorpcijska spektrometrija visokog razlučivanja uz kontinuirani izvor).

Atomska emisijska spektrometrija (AES): plamen, plazma, tinjajući izboji kao ekscitacijski izvori; konstrukcije spektrometara; detekcija emisijskog signala. *Spektrometrija masa uz induktivno spregnutu plazmu (ICP-MS):* prednosti i nedostaci spektrometara u analizi ultra-tragova; tehnika izotopnog razrjeđenja. Napredne instrumentne tehnike temeljene na vezanim sustavima: plinska i tekućinska kromatografija, kapilarna elektroforeza, tinjajući izboji u sprezi s plazmom i/ili spektrometrijom masa. *Usporedba pojedinih metoda:* granice detekcije, koncentracijska mjerna područja, efikasnost u analitičkim zahtjevima.

Procjena rizika u okolišu (osnovne kemijske vrste i adaptacija specija, procjena bioraspodjelivosti i deficijencija, reprezentativne kemijske vrste, ekstrapolacija laboratorij-okoliš); analitičke mogućnosti u monitoringu okoliša; napredne spektrometrijske metode u određivanju esencijalnih i toksičnih elemenata u realnim uzorcima i analizi kvalitete i autentičnosti proizvoda; suvremeni dosezi i izazovi analitike u formiranju novih regulativa

Pokazne vježbe u laboratoriju.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA Stjecanje znanja o atomskim spektrometrijskim metodama i suvremenom eksperimentalnom pristupu elementnoj analizi; proširivanje poznavanja temeljne analitičke metodologije na specifične sustave uzoraka iz okoliša; razvijanje kompetencija za samostalni znanstveno-istraživački i stručni rad

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, seminari, pokazne vježbe, konzultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

- S. J. Hill, *Inductively Coupled Plasma Spectrometry and its Applications*, Blackwell Publishing Ltd. Oxford, 2007.
- A. Sanz-Medel, R. Pereiro, *Atomic Absorption spectrometry: An Introduction*, 2nd Ed., Momentum Press, 2014.
- J.A.C. Broekaert, *Analytical Atomic Spectrometry with Flames and Plasmas*, Wiley-VCH, Weinheim, 2001.
- D. A. Skoog, F. J. Holler, S. R. Crouch, *Principles of Instrumental Analysis*, 6th Ed., Thomson Brooks/Cole, Belmont, USA, 2007.
- J. Noelte, *ICP Emission Spectrometry – A Practical Guide*, Wiley-VCH, Weinheim, 2003.
 - R. Cornelis, *Handbook of Elemental Speciation – Techniques and Methodology*, J. Wiley & Sons Ltd, The Atrium, Southern Gate, Chichester, England, 2003.
- J. D. Ingle, S.R. Crouch, *Spectrochemical Analysis*, Prentice-Hall International Inc, Englewood Cliffs, 1988.

DOPUNSKA LITERATURA: Suvremeni opsežniji revijski članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 8

NAČIN POLAGANJA ISPITA: Pismeno i/ili usmeno

502: ELEKTROANALITIČKE METODE

NASTAVNIK: dr. sc. Irena. Ciglencečki-Jušić, znanstvena savjetnica, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Osnove, definicije i koncepti: Ioni, elektroliti, naboj. Galvanski članak i elektroliza. Faradejev zakon
Osnove, definicije i koncepti elektroanalize: Ioni, elektroliti, naboj. Galvanski članak i elektroliza.
 Elektrokemijske ćelije, termodinamska svojstva i elektrodni potencijali. Električni dvosloj. Osnove kinetike i mehanizmi elektrokemijskih reakcija (brzina, ovisnost struje o naponu, transportni procesi - difuzija, migracija i konvekcija. Faradayski i nefaradayski procesi na elektrodama. Difuzijom i kinetikom kontrolirani procesi. Reverzibilnost, kvazi reverzibilnost, ireverzibilnost reakcija. *Elektrokemijski eksperiment:* Vrste elektroda, „zelena elektrokemija“, elektrokemijska ćelija, osnovni elektrolit, instrumentacija (analogna - potencijostat, galvanostat i digitalna, elektrokemijski senzori, senzori bazirani na nanočesticama. *Pregled elektroanalitičkih metoda s njihovim osnovama:* Načelo provedbe elektroanalitičke metode - signal pobude i signal odziva (Potencijometrija, Voltometrija, Amperometrija, Elektrogravimetrija, Kulometrija, Spektroelektrokemija, Elektrokemijska impedancijska spektroskopija). *Primjeri uporabe elektroanalitičkih metoda u analitičkoj kemiji vezano za stručni i znanstveno-istraživački rad.*

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Stjecanje znanja o teorijskim osnovama elektroanalitičkih metoda i njihovih mogućih primjena u analitici i znanstveno-istraživačkom i stručnom radu.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, seminari, pokazne vježbe, konzultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

- I. Piljac, (Ur.), Elektroanalitičke metode. Teorijske osnove, mjerne naprave i primjena, Udžbenik Sveučilišta u Zagrebu, RMC d.o.o., Zagreb, 1995.
- I. Piljac, (Ur), Senzori fizikalnih veličina i elektroanalitičke metode, Udžbenik Sveučilišta u Zagrebu MediaPrint, Zagreb, 2010.
- A. J. Bard, I. Rubinstein (Ur.), Electroanalytical Chemistry, A Series of Advances, Vol. 20, Marcel Dekker, Inc., New York, 1998
- A.J. Bard, L.R. Faulkner (Ur.), Electrochemical methods: Fundamentals and Applications“, John Wiley and Sons, New York, 2000.
- F.Scholz, (Ur.), Electroanalytical methods, Springer-Verlag, Berlin, 2002.
- J. Wang (Ur.), Analytical Electrochemistry, 3rd Edition, John Wiley and Sons, New York, 2006.
- F. Scholz, (Ur.), Electroanalytical Methods: Guide to Experiments and Application, New York 2010.

DOPUNSKA LITERATURA: Suvremeni opsežniji revijski članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 8

NAČIN POLAGANJA ISPITA: Izrada seminarskog rada i/ili pismeni i/ili usmeni ispit

503: KROMATOGRFSKE METODE U ANALITICI

NASTAVNICI: dr. sc. Vlasta Drevenkar, znanstvena savjetnica u mirovini, Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Zagreb i naslovna redovita profesorica, PMF, Zagreb; dr. sc. Mario Cindrić, znanstveni suradnik, Institut Ruđer Bošković, Zagreb i naslovni docent, PMF, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Podjela kromatografskih analitičkih tehnika: prema agregacijskim stanjima stacionarne i mobilne faze, prema načinu izvedbe, i prema fizikalno-kemijskim procesima. Teorija kromatografskog procesa. Činitelji koji utječu na kromatografski proces. Djelotvornost i selektivnost odjeljivanja. Dobivanje analitičkih podataka iz kromatografskog procesa i njihova obradba. Karakterizacija sastojaka i utvrđivanje udjela sastojaka u ispitivanoj smjesi. Odabir kromatografske metode s obzirom na svojstva analiziranih spojeva. Priprava uzoraka za kromatografsku analizu. *Tekućinska kromatografija (LC).* Priroda pokretne i nepokretne faze. Instrumentacija i prikladni načini detekcije analita Tekućinska kromatografija visoke djelotvornosti: adsorpcijska tekućinska kromatografija, razdjelna tekućinska kromatografija. Kromatografija normalnih i obrnutih faza. Kromatografija ionskih parova. Kiralna kromatografija. Ionska kromatografija. Kromatografija isključenjem. Višedimenzijska kromatografija i vezani sustavi s drugim instrumentnim tehnikama. Kromatografsko razdvajanje i analiza proteinskih smjesa. Primjena. *Plinska kromatografija (GC).* Izbor pokretne i nepokretne faze. Plinsko-tekućinska kromatografija. Adsorpcijska kromatografija. Dijelovi plinskokromatografskog sustava. Višedimenzijska kromatografija i vezani sustavi s drugim instrumentnim tehnikama. Primjene. *Fluidna kromatografija pri superkritičnim uvjetima.* Svojstva pokretne i nepokretne faze. Dijelovi kromatografskog sustava. Primjene. *Kapilarna elektroforeza.* Princip. Instrumentacija i prikladni načini detekcije analita. Kapilarna elektrokromatografija. Micelarna elektrokinetička kapilarna kromatografija. Primjene. *Pokazne vježbe u laboratoriju.*

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Stjecanje znanja o teorijskim zasadama kromatografskih i srodnih separacijskih metoda i suvremenom eksperimentalnom pristupu kromatografskoj analizi sastojaka složenih smjesa; razvijanje kompetencija temeljenih na znanju neophodnih za znanstveno-istraživački i stručni rad

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, seminari, pokazne vježbe, konzultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

- P. Worsfold, A. Townshend, C. Poole (ur.): Encyclopedia of Analytical Science, Second Edition, Elsevier Ltd., Oxford 2005.
- M. Kaštelan-Macan, M. Medić-Šarić, S. Turina: Plošna kromatografija, Farmaceutsko-biokemijski fakultet Sveučilišta u Zagrebu, Zagreb 2006.
- I. Piljac: Elektroforeza, Media Print, Zagreb 2006.
- R. E. Ardrey: Liquid Chromatography–mass spectrometry: An introduction, John Wiley & Sons Ltd., Chichester 2005.
- M. Kaštelan-Macan, M. Petrović (ur.): Analitika okoliša, Hinus&Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije Sveučilišta u Zagrebu, Zagreb, 2013.
- L. T. Taylor, Supercritical Fluid Chromatography, Anal. Chem. 82 (2010)4925–4935.
- J. V. Seeley, S. K. Seeley, Multidimensional Gas Chromatography: Fundamental Advances and New Applications, Anal Chem. 85 (2013)557-578.

DOPUNSKA LITERATURA: Suvremeni opsežniji revijski članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 8

NAČIN POLAGANJA ISPITA: Pismeno i/ili usmeno

504: ANALITIKA ORGANSKIH ZAGAĐIVALA

NASTAVNIK: dr. sc. Marijan Ahel, znanstveni savjetnik, naslovni redoviti profesor, dr. sc. Senka Terzić, znanstvena savjetnica, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Uvod u analitičku kemiju organskih zagađivala; katastar zagađivala – prioriteta zagađivala; osnove fizičke kemije organskih zagađivala; uzorkovanje, obrada i čuvanje uzoraka; postupci za obogaćivanje i frakcioniranje; kvalitativna i kvantitativna analiza; kromatografske metode; spektroskopske metode; elektrokemijske metode; imunokemijske metode; vezani sustavi (GC-MS, LC-MS, ICP-MS); određivanje važnijih skupina specifičnih organskih zagađivala – ugljikovodici, klorirani insekticidi, poliklorirani bifenioli, herbicidi, lakohlapljivi halogenirani ugljikovodici, fenoli, tenzidi, farmaceutski spojevi, organometalni spojevi; osnove statističke obrade podataka – primjena u zaštiti okoliša.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Stjecanje znanja o selektivnim/specifičnim i osjetljivim metodama analize organskih zagađivala temeljenim na najsuvremenijim instrumentnim tehnikama i vezanim sustavima; razvijanje kompetencija temeljenih na znanju neophodnih za znanstveno-istraživački i stručni rad

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, seminari, pokazne vježbe, konzultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

- P.R. Loconto, *Trace Environmental Quantitative Analysis. Principles, Techniques and Applications*, CRC Press, Taylor and Francis Group, Boca Raton, FL, USA, 2006, p. 731.
- D. Barcelo (Ed.), *Sample Handling and Trace Analysis of Pollutants. Techniques, Applications and Quality Assurance*, Elsevier Science, Amsterdam, 2000, p. 1116.
- R.P. Schwarzenbach, P.M. Gschwend, D.M. Imboden, *Environmental Organic Chemistry*, John Wiley & Sons, Inc., New York 2003, p. 1313.
- S. Fanali, P.R. Haddad, C. Pole, P. Schoenmakers, D. Lloyd (Eds.), *Liquid Chromatography: Applications*, Elsevier Inc., Amsterdam, Netherlands, 2013, p. 667.

DOPUNSKA LITERATURA:

- J. Pawliszyn (Ed.), *Comprehensive sampling and sampling preparation*, Elsevier Inc., Amsterdam, Netherlands, 2012, p. 3200.
- B.B. Keccakus, S. Mitra (Eds.), *Environmental Chemical Analysis*, Blackie, London 1998, p. 330.
- D. Perez-Bendito, S. Rubio, *Environmental Analytical Chemistry*, Elsevier, Amsterdam 1999.
- Suvremeni opsežniji revijski članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: Pismeno i/ili usmeno

505: SUVREMENA MOLEKULSKA SPEKTROSKOPIJA

NASTAVNICI: dr. sc. Predrag Novak, redoviti profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu; dr. sc. Klaus Zangger, Professor, Institute of Chemistry, Karl Franzens University of Graz, Austrija; dr. sc. Tomica Hrenar, izvanredni profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu; dr.sc. Saša Kazazić, viši znanstveni suradnik, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Signal i šum. Spektroskopija u vremenskoj i frekvencijskoj domeni. Fourierova transformacija u spektroskopiji. Interferometrija i Fourierova transformacija (FT) u infracrvenoj spektroskopiji (IR). Disperzivna i FT Ramanova spektroskopija. Bliska infracrvena spektroskopija (NIR). Dvodimenzijaska IR spektroskopija. Vremenski razlučena vibracijska spektroskopija (rapid scan i step scan). Suvremene pulsne tehnike nuklearne magnetne rezonancije (NMR). Jedno-, dvo- i višedimenzijaska tehnike. NMR parametri (kemijski pomaci, konstante sprežanja, vremena relaksacije) i molekulska struktura. NMR i konformacijska analiza. NMR biomolekula. Interakcije molekula i dizajn lijekova. Primjena spektroskopije NMR u indistriji. Spektrometrija masa. Analizatori masa: sektorski (magnetski i elektrostatski), kvadrupolni, ionsko ciklotronske rezonancije uz Fourierovu transformaciju (FT ICR), s vremenom proleta (TOF). Metode ionizacije: udarom elektrona (EI), kemijska ionizacija (CI), udarom brzih atoma (FAB) ionizacija laserskom desorpcijom (LDI); matricom potpomognuta ionizacija laserskom desorpcijom (MALDI), ionizacija elektroraspršenjem (ESI). Tandemska spektrometrija masa (MS/MS, MSⁿ). Mehanizmi fragmentacije. Interpretacija spektara. Analiza složenih smjesa spojeva spregnutim tehnikama GC-MS, LC-MS, LC-NMR.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: : Stjecanje znanja o teorijskim zasadama suvremenih metoda molekulske spektroskopije i njihovoj primjeni u analitičkoj kemiji; razvijanje kompetencija temeljenih na znanju neophodnih za znanstveno-istraživački i stručni rad

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, seminari, konzultacije, pokazne vježbe

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

- B. Schrader (Ed.), Infrared and Raman Spectroscopy. Methods and Applications, VCH, Weinheim, 1995.
- I.R. Lewis, H.G.M. Edwards (Eds.), Handbook of Raman Spectroscopy, Marcel Dekker, New York 2002.
- H. Friebolin, Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy, VCH, Weinheim 2005.
- T.D.W. Claridge, High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry, Pergamon, Amsterdam 2009.
- J. H. Gross: Mass Spectrometry, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2011 .

DOPUNSKA LITERATURA: Suvremeni opsežniji revijski članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 8

NAČIN POLAGANJA ISPITA: Pismeno i/ili usmeno

506: SUVREMENE METODE STRUKTURNOG NMR

NASTAVNICI: dr.sc. Predrag Novak, redoviti profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu; dr. sc. Norbert Müller, Professor, Johannes Kepler University. Linz, Austrija; dr. sc. Vilko Smrečki, viši znanstveni suradnik, Institut Ruđer Bosković, Zagreb; dr. sc. Jelena Parlov Vuković, znanstvena suradnica, INA; dr. sc. Janez Plavec, redoviti profesor, Kemijski institut, Ljubljana, Slovenija

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

NMR čvrstog stanja, CP MAS NMR tehnike, kvadrupolne jezgre, korelacija NMR spektara čvrstog stanja i makroskopskih svojstava, križna relaksacija i križna korelacija, suvremene višepulsne NMR tehnike.

Računske metode za određivanje kemijskog pomaka i konstanti sprege spin-spin, molekulska dinamika i korištenje modela otapala u proračunima parametara NMR, vizualizacija nuklearnog zasjenjenja i nuklearne sprege, proračuni parametara NMR u proteinima i nukleinskim kiselinama, karakterizacija tenzora NMR (suradnja teorije i eksperimenta), karakterizacija konstanti sprege spin-spin kroz vodikovu vezu.

Struktura nukleinskih kiselina pomoću jedno- i višedimenzijskih NMR tehnika i molekuskog modeliranja, parovi baza i vodikove veze, interakcija kationa i nukleinskih kiselina, izučavanje kinetike izmjene.

Interakcije malih molekula i bioloških receptora, NMR tehnike prijenosnog NOE efekta, tehnike razlike prijenosa zasićenja (STD), difuzijske tehnike, probir bioaktivnih molekula tehnikama kao što su "SAR by NMR" i sl. Jedno- i dvo-dimenzijske tehnike NMR za analizu složenih smjesa spojeva u industriji (DOSY i sl.)

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Stjecanje znanja o teorijskim zasadama i praktičnoj primjeni spektroskopije nuklearne magnetske rezonancije u čvrstom stanju, stjecanje znanja o suvremenim računskim metodama za određivanje NMR parametara i eksperimentalnim metodama za studij interakcija molekula te razvijanje kompetencija temeljenih na znanju neophodnih za znanstveno-istraživački i stručni rad te primjenu u industriji.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja, seminari, pokazne vježbe, konzultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

- Melinda J. Duer, Introduction to Solid-State NMR Spectroscopy, Blackwell Publishers, 2004.
- James Keeler, Understanding NMR Spectroscopy, John Wiley & Sons, 2006.
- M. Kaupp, M. Buehl, and V.G. Malkin, Calculation of NMR and EPR Parameters, Theory and Applications, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2004.
- O. Zerbe, Ed.: BioNMR in Drug Research. Methods and Principles in Medicinal Chemistry. Wiley-VCH, Weinheim, 2003.

DOPUNSKA LITERATURA: Suvremeni opsežniji revijski članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno i/ili usmeno

552: ELEKTROKEMIJA OKOLIŠA

NASTAVNICI: dr. sc. Blaženka Gašparović, znanstvena savjetnica i dr. sc. Dario Omanović, viši znanstveni suradnik, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

- Osnove elektrokemijskih mjerenja:
- struja, naboj, potencijal, prijenos naboja i mase, elektrokemijska ćelija, granica elektroda/elektrolit, oksido-redukcijski i adsorpcijski procesi
- elektrokemijske metode i tehnike (potenciometrija, amperometrija, voltametrija, polarografija, konduktometrija, "stripping" metode, ...)
- elektrokemijska instrumentacija i oprema
- Primjena:
- Elektroanalitika anorganskih i organskih spojeva prirodnog i antropogenog porijekla u vodi, zraku, sedimentu i tlu - Monitoring okoliša
- „In-situ“ mjerenja elektrokemijskim sensorima (ion selektivne elektrode, pH, kisik, redoks potencijal, H₂S, ...)
- Elektrokemijske tehnologije za obradu zagađivala u otpadnim vodama
- Elektrokemija za zdravi okoliš (fiksiranje CO₂, foto-elektrokemija,...)

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA:

Stjecanje znanja o mogućnostima primjene elektrokemije u istraživanju i zaštiti okoliša; uvođenje u samostalni znanstveno-istraživački i stručni rad.

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA:

Predavanja, seminari, pokazne vježbe, konzultacije

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

- I. Piljac, *Elektroanalitičke metode, Teorijske osnove, mjerne naprave i primjena*, Udžbenici Sveučilišta u Zagrebu, RMC, 1995, p. 409.
- J. Wang, *Analytical Electrochemistry*, 3rd Edition, John Wiley, Hoboken, 2006, p. 250.
- C. Comninellis and G. Chen, *Electrochemistry for the Environment*, Springer, New York, 2010, p. 563.

DOPUNSKA LITERATURA:

- A. J. Bard and L. R. Faulkner, *Electrochemical Methods*, John Wiley, New York, 2001, p. 833.
- F. Scholz, *Electroanalytical Methods-Guide to Experiments and Applications*, Springer, Heidelberg, 2010, p. 359.
- Revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: Pismeno i/ili usmeno i/ili seminarski rad

553: UPRAVLJANJE KAKVOĆOM ANALITIČKIH POSTUPAKA

NASTAVNICI: dr. sc. Zrinka Dragun, viša znanstvena suradnica, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA:

Upravljanje kakvoćom temeljni je dio osiguranja pouzdanosti analitičkih postupaka. Postupci upravljanja kakvoćom imaju svrhu smanjiti pogreške i osigurati analitičke rezultate prihvatljive točnosti i preciznosti s obzirom na namjenu ispitivanja. Sastavnice upravljanja kakvoćom su sljedeće: opremljenost laboratorija u skladu sa svrhom i opsegom rada, stručna osposobljenost suradnika, dobra laboratorijska praksa, dobra mjeriteljska praksa, standardni radni postupci koji uključuju validirane analitičke metode, protokoli posebne namjene, unutrašnja neovisna ocjena rada laboratorija, primjena referentnih materijala i uzoraka, pohranjivanje i dostupnost podataka, bilješki i izvješća, školovanje i usavršavanje laboratorijskog osoblja te vanjska ocjena osposobljenosti laboratorija postupkom akreditacije.

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: Stjecanje znanja o postupcima upravljanja kakvoćom analitičkih postupaka. Razvijanje kompetencija u odabiru analitičkih metoda, validaciji metoda i određivanju mjerne nesigurnosti, postupcima pripreme laboratorija za provjeru osposobljenosti i akreditaciju

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: Predavanja i izrada seminarske radnje.

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA:

- J HRN EN ISO/IEC 17025:2007, Opći zahtjevi za osposobljenost ispitnih i umjernih laboratorija (ISO/IEC 17025:2005+Cor.1:2006; EN ISO/IEC 17025:2005+AC:2006), Hrvatski Zavod za Norme, Zagreb, 2007.
- B.W. Wenclawiak, M. Koch, E. Hadjicostas (urednici), Quality Assurance in Analytical Chemistry: Training and Teaching, drugo izdanje, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 2010.
- B. Magnusson, U. Örnemark (urednici), Eurachem Guide: The fitness for purpose of analytical methods - A Laboratory Guide to Method Validation and Related Topics, second edition, EURACHEM, 2014.
- S.L.R. Ellison, A. Williams (urednici), Eurachem/Citac Guide CG4: Quantifying Uncertainty in Analytical Measurements, third edition, EURACHEM/CITAC, 2012.
- Statistika - Rječnik i znakovi, 2. dio. Statističko upravljanje kakvoćom, Hrvatska norma HRN ISO 3534-2, Državni zavod za normizaciju i mjeriteljstvo, Zagreb, 1997.

DOPUNSKA LITERATURA: Suvremeni opsežniji revijski članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: Izrada seminarske radnje i usmeni ispit

581: ODABRANA POGLAVLJA ANALITIČKE KEMIJE

AUTOR(I) PROGRAMA: Gostujući nastavnik

OKVIRNI SADRŽAJ PREDMETA: ovisno o programu kolegija

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA: specifična znanja iz analitičke kemije

OBLICI PROVOĐENJA NASTAVE I NAČIN PROVJERAVANJA ZNANJA: ovisno o programu kolegija

POPIS LITERATURE POTREBNE ZA STUDIJ I POLAGANJE ISPITA: ovisno o programu kolegija

DOPUNSKA LITERATURA: revijalni članci i znanstvene monografije

ECTS BODOVI: 5

NAČIN POLAGANJA ISPITA: pismeno ili usmeno ili seminarski rad
