

Kemija; modul: istraživački

Diplomski studij

Informacijski paket za ak. god. 2025./2026.

Prirodoslovno-matematički fakultet
Sveučilište u Zagrebu



19. lipnja 2026.

Sadržaj

Analitička biokemija (44038)	5
Anorganski reakcijski mehanizmi (44012)	7
Bioanalitika (128621)	9
Bioanorganska kemija (43979)	11
Biofizika stanice (44039)	13
Difrakcijske metode određivanja kristalnih struktura (43978)	15
Ekstrakcijske tehnike (43999)	16
Elektrokemija (43984)	18
Elementna i specijacijska analiza (44000)	20
na engleskom jeziku) (172951)	22
Enzimski kataliza u organskoj sintezi (44055)	24
Fizikalna anorganska kemija (72801)	26
Fizikalna kemija makromolekula (44046)	28
na engleskom jeziku) (172953)	30
Fizikalna supramolekulska kemija (240408)	31
Fizikalno - kemijske metode istraživanja lijekova (240403)	33
Fizikalno - organska kemija (88324)	35
Fotokemija (43994)	36
Genetika i proteinsko inženjerstvo (43980)	38
Genomika i bioinformatika (128620)	41
Heterociklička kemija (72825)	43
Instrumentna analitika 1 (43971)	45
Instrumentna analitika 2 (43975)	47
(72803)	49
na engleskom jeziku) (295343)	51
Kemija materijala (43986)	52
Kemija molekulskih krutina (72806)	54
Kemija prirodnih organskih spojeva (44051)	56
Kemija čvrstog stanja (43985)	58
Kemijska kinetika (43991)	60
Kemijska termodinamika (227531)	62
Kemijski koncepti u molekularnoj gastronomiji (240409)	64
na engleskom jeziku) (258231)	66
Kemijski senzori (43998)	68
Kemometrija (44045)	70

Sadržaj

Koloidna i međupovršinska kemija (43981)	72
Kompleksni spojevi prijelaznih metala u katalizi (44020)	74
Kristalni inženjering (72805)	76
Kristalokemija (43976)	78
Kvantna kemija (227530)	80
Magnetokemija (72802)	81
Mehanizmi katalize u biološkim sustavima (72841)	82
Metali i liganтна reaktivnost (240413)	84
Metode sinteze u organskoj kemiji (44056)	86
Modeliranje biomakromolekula (198316)	88
Molekularna biofizika (198313)	91
Molekularna genetika (44030)	92
Molekularna spektroskopija (227532)	95
Odabrana poglavlja organske kemije (72837)	97
Osnove medicinske kemije (270691)	99
Primijenjena vibracijska spektroskopija (44002)	101
Proteinska kristalografija (198315)	103
Radioanalitičke metode (43973)	105
Računalna kemija (43983)	107
Sinteza u anorganskoj kemiji (44014)	109
Spektroskopska strukturna analiza (44004)	111
Stanična biokemija (72839)	113
Strukturna računalna biofizika (198314)	115
Stručna praksa (212150)	116
Teorijska kemija (72796)	117
Upravljanje kvalitetom u analitičkom laboratoriju (43997)	119
Vezani sustavi u analitičkoj kemiji (44005)	121
Višedimenzijska NMR spektroskopija (44006)	122
Višestruki praktikum analitičke kemije 1 (43995)	124
Višestruki praktikum analitičke kemije 2 (44001)	126
Višestruki praktikum anorganske kemije (44010)	127
Višestruki praktikum biokemije (44023)	129
Višestruki praktikum fizikalne kemije 1 (44042)	131
Višestruki praktikum fizikalne kemije 2 (44049)	133
Višestruki praktikum organske kemije (44053)	135

Sadržaj

izvoden na engleskom jeziku) (199217)	137
Kristalokemija (kolegij izvoden na engleskom jeziku) (172954)	138

Analitička biokemija (44038)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Iva Juranović Cindrić
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Iva Juranović Cindrić (P, S)

Opis predmeta

Apsorpcijske spektroskopske metode karakterizacije biomolekula i njihova primjena u kliničkoj kemiji (biološki važni kromofori). Molekulska fluorescencija (primjena na farmaceutskim i kliničkim uzorcima te prirodnim spojevima, FRET, FISH, zeleni fluorescentni protein). Atom-ska spektroskopija (primjena elementne analize za biološke uzorke i u kliničkoj kemiji). Primjena spektroskopije nuklearne magnetske rezonancije za određivanje strukture biomakromolekula (proteini, DNA/RNA, kompleksi proteina s DNA/RNA, polisaharidi). Primjena spektrometrije mase u kliničkoj kemiji (praćenje djelovanja lijekova, određivanje vitamina i steroida). Elektroanalitičke metode u medicinskoj biokemiji (primjena biosenzora i ion selektivnih elektroda u laboratorijskim pretragama za određivanje iona (K, Na, Ca), enzima ili supstrata (npr. ureaza, kreatin-kinaza ili glukoza, kolesterol), plinova (kisik, ugljikov dioksid). Primjeri određivanja aminokiselina kolorimetrijskim, fluorimetrijskim, mikrobiološkim i enzimskim metodama. Metode za određivanje i pročišćavanje nukleinskih kiselina i proteina (ultracentrifugiranje, kromatografija, elektroforeza). Metode određivanja i odjeljivanja ugljikohidrata i lipida (kromatografija, enzimске i kolorimetrijske metode, elektroforeza). Primjena imunokemijskih metoda za određivanje lijekova, hormona, alergena, vitamina, ksenobiotika. Enzimске metode u kliničkoj kemiji (enzimi kao analitički reagensi ili terapijski spojevi, dijagnosticiranje oboljenja, ELISA).

ISHODI UČENJA:

- razumjeti i primjeniti osnovne statističke postupke na rezultat analize biomolekula različitim analitičkim metodama
- navesti posebnosti uzorkovanja i pripreve bioloških uzoraka prije analize
- opisati načela i primjenu kromatografskih metoda (tekućinska planarana i kromatografija u koloni, adsorpcijska kromatografija, tekućinska kromatografija visoke djelotvornosti, ionsko-izmjenjivačka kromatografija, kromatografija isključenjem, afinitetna i plinska kromatografija)
- opisati načela i primjenu elektroforeze i centrifugiranja pri proučavanju DNA i proteina
- objasniti načela i primjenu spektroskopskih metoda (apsorpcijske metode, fluorimetrija, metode atomske spektrometrije, atomska emisijska spektrometrija uz induktivno spregnutu plazmu)

- navesti načela i primjenu nuklearne magnetske rezonancije u medicinskoj dijagnostici i pri određivanju strukture spojeva (proteini, nukleinske kiseline, kompleksi proteina i DNA(RNA))
- opisati primjenu spektrometrije masa pri određivanju spojeva (vitamini, steroidi, lijekovi, proteini, nukleinske kiseline)
- objasniti primjenu elektroanalitičkih metoda (potenciometrijske metode, biosenzori, rezonancija površinskih plazmona i selektivne elektrode)
- razumjeti primjenu biosenzora i njihovu interakciju s aktivnim molekulskim vrstama u svrhu određivanja različitih analita
- opisati primjenu enzima za biološke uzorke, kao regansa (npr. u medicinskoj dijagnostici, ELISA) i u imunoenzimskim testovima
- objasniti načela i primjenu imunokemijskih metoda i testova za biomolekule (npr. lijekove, hormone, alergene, vitamin i ksenobiotike)
- primijeniti usvojeno znanje i odabrati najpogodniju analitičku metodu prema vrsti biomolekule koju želimo odrediti

Literatura

• Obavezna literatura:

- 1. 1. S. R. Mikkelsen, E. Cortón: Bioanalytical Chemistry, Wiley, 2004.
- 2. D. Holme, H. Peck, Analytical Biochemistry, Prentice Hall, 1998.
- 3. J.S. Varcoe, Clinical Biochemistry: Techniques and Instrumentation, A Practical Course, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. 2001
- 2. J. Cavanagh, W.J. Fairbrother, A.G. Palmer i N.J. Palmer: Protein NMR Spectroscopy. Principles and Practice. Academic Press, San Diego, 1996.
- D. A. Skoog, F. J. Holler i A. Nieman, Principles of Instrumental Analysis, 5 izd., Saunders College Publishing, New York, SAD, 1998.

Ishodi učenja

1. OPĆENITI ISHODI UČENJA:

Sposobnost primjene ranije svladanog gradiva iz analitičke kemije na specifične složenije sustave. Razumijevanje osnovnih načela na kojima se temelje moderne analitičke metode za određivanje biološki važnih molekula i realnih uzoraka. Naglasak je na primjeni analitičkih tehnika u farmaceutici, medicinskoj biokemiji, molekularnoj biologiji, agronomiji, forenzici, itd. Upoznavanje s novim analitičkim tehnikama u modernim laboratorijima. Sposobnost odabira, razvoja i optimiranja odgov

Anorganski reakcijski mehanizmi (44012)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - doc. dr. sc. Vinko Nemec
- Izvođači:
 - dr. sc. Nikola Bedeković (S)
 - doc. dr. sc. Vinko Nemec (P)

Opis predmeta

NASTAVNI SADRŽAJ: Brzina kemijske reakcije i zakon brzine. Kinetičko ponašanje kompleksa. Mehanizmi i aktivacijski parametri. Određivanje brzine kemijske reakcije. Supstitucijske reakcije kod oktaedarskih, planarnih, pentakoordiniranih i tetraedarskih kompleksa. Reakcije zamjene koje uključuju mono- i polidentatne ligande. Oksidacijsko-redukcijske reakcije. Premošćujući ligandi. Reakcije u unutarnjoj i vanjskoj koordinacijskoj ljusci i reakcije s prijenosom elektrona. Promjena reaktivnosti liganda nakon nastajanja kompleksa. Stereoke-mijska promjena. Konformacijska promjena i izomerija. Racemizacija tetraedarskih kompleksa. Organometalne supstitucijske reakcije. Homogena kataliza s kompleksima prijelaznih metala. Anorganska fotokemija.

U okviru seminara studenti obrađuju aktualne znanstvene probleme vezane uz tematiku predmeta i usmeno ih prezentiraju.

ISHODI UČENJA:

1. Objasniti osnovne pojmove vezane uz brzinu kemijske reakcije (zakon brzine) i eksperimentalne metode određivanja brzine reakcije.
2. Kvalitativno i kvantitativno opisati pojedine mehanizme koje susrećemo u kemiji kompleksnih spojeva.
3. Objasniti osnovne čimbenike koji određuju termodinamičku i kinetičku stabilnost kompleksa.
4. Objasniti važnost svojstava liganada kao i utjecaj geometrije liganada na reaktivnost.

Literatura

- Obavezna literatura:
 - 1. Ralph G. Wilkins, Kinetics and Mechanisms of Reactions of Transition Metal Complexes, 2nd Ed., VCH, New York, 1991.
 - 2. Jim D. Atwood, Inorganic and Organometallic Reaction Mechanisms, 2nd Ed., Wiley-VCH, 1997.

- 3. Robert B. Jordan, Reaction Mechanisms of Inorganic and Organometallic Systems, 3rd Ed., Oxford University Press, 2007.
- 4. F. A. Cotton, G. Wilkinson, C. A. Murillo, M. Bochmann: Advanced Inorganic Chemistry, 6. izd., Wiley, New York, 1999.
- 5. Smiljko Ašperger, Kemijska kinetika i anorganski reakcijski mehanizmi, Hrvatska akademija znanosti i umjetnosti, Zagreb, 1999.

Bioanalitika (128621)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - nasl. doc. dr. sc. Mario Cindrić
- Izvođači:
 - nasl. doc. dr. sc. Mario Cindrić (P, S)

Opis predmeta

Kolegij će obuhvatiti 9 nastavnih cjelina od kojih će svakoj biti posvećeno oko tri sata nastave. Za svaku cjelinu od studenata se očekuju dodatna 2 sata samostalnog rada za svladavanje gradiva i rješavanja postavljenih problema (nakon svake završene nastavne cjeline studenti u grupama od po 3 će dobiti praktičan zadatak kojim će se pripremiti za iduću nastavnu cjelinu). Mikroseparacijske tehnike i priprema uzorka (kapilarne i nano tehnike korištene u pripravi uzoraka, ukoncentriravanje, derivatizacija i specifična separacija bioanalita). Separacijske tehnike korištene u svrhu kvalitativne i kvantitativne analize te izolacije (kapilarna elektroforeza, 2-D gel elektroforeza, tekućinska, ionska i imunoafinitetna kromatografija, ultracentrifugiranje i karakterizacija molekulskih kompleksa i razdvajanje protočnim poljem). Kemijska i enzimatska fragmentacija proteina: pristupi odozgor nadolje i odozdol nagore. Metode sekvenciranja proteina (Edmanova odgradnja, aminokiselinska analiza, enzimatsko cijepanje, sekvenciranje u plinskoj fazi, određivanje prostetičkih grupa). Postranslacijske modifikacije (fosforilacija, glikozilacija, acetilacija, ubikvitinacija, disulfidni mostovi, sulfonacija, oksidacija, deamidacija itd., mikro- i makro-heterogenost i specifični načini detekcije). Kvantitativni PCR (qPCR, multiplex qPCR, real-time PCR, reverse transcription quantitative PCR, RT-qPCR). Imunokemijske metode detekcije (Western blot, ELISA, upotreba poliklonskih i monoklonskih protutjela). Visokoprotočne analize (svrha visokoprotočnih analiza, upotreba automatizacije i robotike u bioanalitici, tehnika diferencijalnog prikaza). Bioinformatički alati spektrometrije masa (spektralne baze podataka proteina i peptida i načini pretraživanja nakon analize spektrometrijom masa, MASCOT, ProteinProspector, OMSSA itd.)

ISHODI UČENJA: Studenti će nakon uspješno položenog kolegija biti sposobni: - pokazati razumijevanje principa rada, koncepta, vokabulara i terminologije vezanih uz bioanalize makromolekula - klasificirati biomolekule prema separacijskim tehnikama (npr. kapilarna elektroforeza za DNA ili RNA molekule, tekućinska kromatografija obrnutih faza za peptide i proteine) - navesti i objasniti instrumentalne tehnike analize neophodne za uspješnu provedbu kvalitativne ili kvantitativne analize biomolekula - navesti tehnike pripreme uzoraka u ovisnosti o vrsti analizirane biomolekule, te objasniti biokemijske procese i kemijske mehanizme pripreme uzoraka koje

prethode uspješnim bioanalizama - riješiti teoretske i praktične probleme analize kompleksnih smjesa biopolimera

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- 1. 1. Microcharacterization of Proteins, Roland Kellner, Friedrich Lottspeich, Helmut E. Meyer, WILEY VCH, 2nd Edition, 1999. 2. Medicina, Vol.45 No.3, 2009 (<http://hrcak.srce.hr/medicina>). 3. Principles and practice of bioanalysis, Richard F Venn, 2nd Edition, 2008.

Bioanorganska kemija (43979)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:

– prof. dr. sc. Ivica Đilović

- Izvođači:

– prof. dr. sc. Ivica Đilović (P, S)

Opis predmeta

NASTAVNI SADRŽAJI:

Uloga metala u biološkim sistemima. Biomineralizacija. Odnos strukture i uloge metaloproteina. Unos, prijenos i skladištenje metala u organizmima (metaloproteini i neproteini u ulozi prijenosa i skladištenja). Biološka uloga Fe, Co, Zn, Ni, Mo, W, V, Cr i Mn u metaloproteinima. Odabrani metaloproteini kao primjeri određenih katalitičkih mehanizama. Alkalijski i zemnoalkalijski metalni ioni: kataliza i regulacija. Alkalijski i zemnoalkalijski kationi kao elektroliti. Toksični metali i nemetali. Anorganski radionuklidi u dijagnostici i terapiji. Kemoterapija spojevima neesencijalnih elemenata.

ISHODI UČENJA:

- skicirati dijagrame molekulskih orbitala dvoatomnih vrsta; razlikovati primarnu, sekundarnu, terciarnu i kvaternu strukturu proteina
- razlikovati procese biomineralizacije; objasniti procese nukleacije i rasta kristala
- objasniti osnovna svojstva transportnih sustava (metalnih iona); nabrojiti proteine koji sudjeluju u transportu i skladištenju metalnih iona; objasniti ulogu feritina
- usporediti Weissov i Paulingov model vezanja kisika; objasniti uzroke dijamagnetičnosti oksihemoglobina; skicirati aktivno mjesto deoksi i oksi forme molekule hemocijanina
- objasniti ulogu hemoproteina u prijenosu elektrona; skicirati Fe-S centre u proteinima
- razlikovati vitamine prema prostornoj građi i topljivosti u vodi/masti; razlikovati korinski i porfirinski prsten; usporediti kemijske reakcije u kojima sudjeluje kobalamin
- usporediti proteine koji sadrže bakrove i željezove ione; klasificirati proteine koji sadrže bakrove ione prema geometriji i sastavu aktivnog mjesta
- razlikovati ulogu cinkovih iona u proteinima te navesti primjere proteina s različitim ulogama
- objasniti ulogu Mo-ovisne nitrogenaze; skicirati aktivno mjesto nitrogenaze
- skicirati aktivno mjesto enolaze; skicirati EF-ruku; usporediti sintetske i prirodne ionofore; razlikovati ionske kanale i ionske pumpe

Literatura

• Obavezna literatura:

- 1. W. Kaim, B. Schwederski, Bioinorganic Chemistry: Inorganic Elements in the Chemistry of Life, Wiley, Chichester, 1994, ISBN 0-471-94369-x.
- 4. D. E. Fenton, Biocoordination Chemistry, Oxford University Press, Oxford, UK, 2002
- 5. I. Bertini, H. B. Gray, E. I. Stiefel i J. S. Valentine, Biological Inorganic Chemistry, Univ. Science Books, Sausalito, California, SAD, 2007

• Preporučena literatura:

- 2. J.J.R. Frausto da Silva, R.J.P. Williams: The Biological Chemistry of the Elements: the Inorganic Chemistry of Life, Oxford Univ. Press, Oxford 1994, ISBN 0 19 855598 3
- 3. R. M. Roat-Malone, Bioinorganic Chemistry, A Short Course, J. Wiley & Sons, New Jersey, USA, 2002
- 6.
<http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>
http://www.proteopedia.org/wiki/index.php/Main_Page

Ishodi učenja

1. skicirati dijagrame molekulskih orbitala dvoatomnih vrsta;
2. razlikovati primarnu, sekundarnu, tercijarnu i kvaternu strukturu proteina
3. razlikovati procese biomineralizacije;
4. objasniti procese nukleacije i rasta kristala
5. objasniti osnovna svojstva transportnih sustava (metalnih iona); nabrojiti proteine koji sudjeluju u transportu i skladištenju metalnih iona;
7. objasniti ulogu feritina
8. objasniti uzroke dijamagnetičnosti oksihemoglobina;
9. objasniti uzroke dijamagnetičnosti oksihemoglobina;

Biofizika stanice (44039)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Nenad Pavin
 - izv. prof. dr. sc. Marina Ilakovac Kveder
- Izvođači:
 - izv. prof. dr. sc. Marina Ilakovac Kveder (P)
 - prof. dr. sc. Nenad Pavin (P)
 - doc. dr. sc. Maja Novak (P, S)

Opis predmeta

Supramolekularna građa eukariotskih stanica. Struktura i funkcija staničnog skeletal. Visko-elastična svojstva stanice. Biološki molekularni motori, stanično kretanje. Pojavnost biomembrana: zašto nastaju i kako definirati njihov oblik. Fazni prijelazi u biomembranama. Heterogenost i asimetrija u organizaciji gradbenih molekula. Liposomi. Transport kroz membranu. Mehanizmi transporta tvari u citoplazmi. Molekularna dinamika biomembrana. Signalni putevi i prijenos informacija

ISHODI UČENJA: 1. navesti i opisati osnovne pojmove stanične biofizike; 2. objasniti i usporediti makromolekule kao građevne elemente stanice; 3. koristiti metode hidrodinamike i statističke fizike u opisu transportnih procesa u biofizici (tok krvi kroz kapilare, kretanje bakterija, difuzija u stanici); 4. koristiti metode statističke fizike u opisu mehanike i dinamike citoskeleta; 5. navesti te objasniti osnovne pojmove fraktalne geometrije i primijeniti ih u opisu geometrije stanične membrane; 6. razlikovati slučajno i deterministički generirane eksperimentalne podatke u biologiji; 7. navesti i opisati lipidne supramolekulske agregate; 8. koristiti teoriju faznih prijelaza u opisu biomembrana;

Literatura

- Obavezna literatura:
 - 1. T. F. Weiss, Cellular Biophysics, 1996 MIT, ISBN 0-262-23184-0 2. B. Alberts i suradnici, Molecular Biology of the Cell, 4th edition, New York: Garland Publishing, 2002
- Preporučena literatura:

- 2. Biochimica et Biophysica Acta - Biomembranes; Reviews of Biomembrane. Elsevier J. Howard, Mechanics of Motor Proteins and the Cytoskeleton, Sunderland MA: Sinauer Associates, 2001 D. Bray: Cell Movements, 2. izd., New York: Garland Publishing, 2001

Difrakcijske metode određivanja kristalnih struktura (43978)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Ivica Đilović
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Ivica Đilović (P, S)

Opis predmeta

NASTAVNI SADRŽAJ:

Izvori roentgenskih zraka, pojmovi o simetriji, kristalnoj rešetki, kristalizacijskim tehnikama, difrakciji i intenzitetu difrakcijskih maksimuma. Usporedba različitih eksperimentalnih metoda rješavanja struktura. Problem faza, uloga Fourierovih transformacija i operacije konvolucije u rješavanju kristalnih struktura, utočnjavanje struktura metodom najmanjih kvadrata, geometrijska analiza i predstavljanje riješenih kristalnih i molekulskih struktura.

ISHODI UČENJA:

1. Objasniti prednosti/nedostatke rentgenske strukturne analize za određene uzorke u usporedbi s drugim difrakcijskim metodama (neutronsom i elektronskom difrakcijom).
2. Opisati izvore i detektore rentgenskog zračenja, neutrona i elektrona.
3. Upotrijebiti osnovne pojmove o simetriji, kristalnoj rešetki, difrakciji i intenzitetu difrakcijskih maksimuma.
4. Opisati problem faza.
5. Sakupiti difrakcijske podatke, riješiti i utočniti kristalne strukture te grafički prikazati strukture korištenjem odgovarajućih računalnih programa
6. Pretraživati kristalografske baze podataka.

Literatura

- Obavezna literatura:
 1. C. Giacovazzo et al.: Fundamentals of Crystallography, 2. izdanje, Oxford Univ. Press, Oxford 2002.
 2. Jan Drenth: Principles of Protein Crystallography, 3. izdanje, Springer Science, 2007.
 3. I. Vicković: Difrakcijske metode određivanja kristalnih struktura, interna skripta, 1996.

Ekstrakcijske tehnike (43999)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Iva Juranović Cindrić
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Iva Juranović Cindrić (P, S)

Opis predmeta

Uvod: kratki pregled separacijskih metoda u analitičkoj kemiji. Ekstrakcija u kemijskoj analizi. Čimbenici koji utječu na učinkovitost ekstrakcije (priroda otapala, priroda i koncentracija reagensa, ionska jakost, kiselost, višestruka ekstrakcija, selektivnost, sinergistički efekti. i dr.). Kvantitativni aspekti ekstrakcije (koeficijent razdiobe, postotak ekstrakcije). Ekstrakcija metalnih iona, neutralnih kelatnih kompleksa, ionskih parova. Vrste: ekstrakcija otapalom, ekstrakcija fluidom u superkritičnom uvjetima, ekstrakcija na čvrstim nosačima, mikro-ekstrakcija. Prednosti ekstrakcije u odnosu na druge separacijske metode. Industrijska primjena različitih ekstrakcijskih tehnika.

Sadržaj se može dopunjavati s novim znanstvenim dostignućima.

ISHODI UČENJA:

- odabrati i primijeniti najpogodniju separacijsku tehniku
- navesti prednosti i nedostatke ekstrakcijskih tehnika u kemijskoj analizi
- objasniti korake pri optimiranju postupka ekstrakcije
- definirati parametre kvantitativnosti postupka ekstrakcije (postotak i učinkovitost ekstrakcije, selektivnost)
- objasniti čimbenike koji utječu na ekstrakciju (izbor otapala, ionska jakost, višestruka ekstrakcija, itd.)
- razlikovati i objasniti različite postupke ekstrakcije prema vrsti uzorka
- objasniti načela i primjenu različitih ekstrakcijskih tehnika (ekstrakcija tekuće-tekuće ekstrakcija po Soxletu, ubrzana ekstrakcija otapalom, ekstrakcija potpomognuta mikrovalovima, ekstrakcija potpomognuta ultrazvučnim valovima, ekstrakcija fluidom u superkritičnom uvjetima, ekstrakciju na čvrstim nosačima i mikro-ekstrakcija, ekstrakcija metalnih iona, ekstrakcija s površinski aktivnim tvarima)
- primijeniti usvojeno znanje na uobičajene praktične probleme u postupku separacije

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- 3. J. R. Dean, Extraction Methods for Environmental Analysis, John Wiley & Sons; New York, 1998
- 4. Larry T. Taylor, Supercritical Fluid Extraction, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1996.

- **Preporučena literatura:**

- 1. M. S. Mills, E. M. Thurman, Solid-Phase Extraction: Principles and Practice, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1998.
Developments in Solvent Extraction, Editor, S Allegret, Ellis Horwood Limited, Publ. Chichester, England, 1988.
Novi znanstveni radovi.

Elektrokemija (43984)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - izv. prof. dr. sc. Nikola Bregović
- Izvođači:
 - Ivor Vavra Plavšić, univ. mag. chem. (S)
 - izv. prof. dr. sc. Nikola Bregović (P)

Opis predmeta

Otopine elektrolita: strukturni modeli jakih elektrolita (Debye&Hückel, Bjerrum, Fuoss); slabi elektroliti, polielektroliti. Galvanski članci: električki dvosloj na granici faza, elektromotivnost (elektromotorna sila) ? definicija i mjerenje; ion-selektivne elektrode; potenciometrija i potenciometrijska titracija. Kinetika elektrodnih procesa: polarizacija, prenapon; Butler-Volmerov model, Tafelov prikaz; elektrode: kapajuća živina elektroda, stacionarna elektroda, rotirajuća elektroda. Voltammetrijske tehnike: polarografija, stacionarna voltammetrija, voltammetrija s linearnom promjenom potencijala, ciklička voltammetrija, pravokutnovalna voltammetrija, voltammetrija anodnog i katodnog otapanja, elektrokemijska impedancijska spektroskopija. Primjene: elektrokemijska analiza, gorivni članci, korozija, bioelektrokemija.

ISHODI UČENJA:

Očekuje se da će nakon uspješno položenog ispita studenti moći

1. Opisati i objasniti svojstva elektrolitnih otopina
2. Opisati i usporediti strukturne modele otopina jakih elektrolita (Debye&Hückel, Bjerrum, itd)
3. Pokazati i objasniti primjenu staklene elektrode za mjerenje pH.
4. Imenovati osnovne voltammetrijske metoda i objasniti njihova najvažnija obilježja.
5. Opisati i objasniti kinetiku elektrodnih procesa primjenom Butler-Volmerovog modela.
6. Pokazati primjenu elektrokemije na primjerima elektrokemijske analize, gorivnih članaka, korozije i bioelektrokemije.

Literatura

- Obavezna literatura:
 - 1. A. J. Bard, L. R. Faulkner: Electrochemical Methods, Wiley, New York, 2001.
 - 2. J. Wang: Analytical Electrochemistry, Wiley, New York, 2000.

- 3. J. O'M. Bockris, A. K. N. Reddy, Modern Electrochemistry, Vol. 1, 2. izd., Kluwer Academic/Plenum Press, New York, 2002.
- 4. K. B. Oldham, Fundamentals of Electrochemical Science, Academic Press, Inc., San Diego, 1994.
- 5. P. W. Atkins, J. de Paula: Atkins' Physical Chemistry, 9. izd., Oxford Univ. Press, Oxford, 2010.
- 8. I. Piljac: Senzori fizikalnih veličina i elektroanalitičke metode, Media Print, Zagreb, 2010.

• **Preporučena literatura:**

- 6. I. Piljac: Elektroanalitičke metode, RMC, Zagreb, 1995.
- 7. Vl. Simeon: Equilibria in Electrolyte Solutions, u: N. Kallay (ur.), Interfacial Dynamics, M. Dekker, New York, 2000.

Elementna i specijacijska analiza (44000)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Sanda Rončević
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Sanda Rončević (P, S)

Opis predmeta

NASTAVNI SADRŽAJ:

Specijacija kao skup analitičkih djelovanja u identifikaciji i određivanju jednog ili više pojava oblika elemenata određenih izotopnim sastavom, oksidacijskim stanjem, strukturom kompleksa ili makromolekula. Kemijske specije u tragovima, toksične i esencijalne elementne specije, bioraspoloživost kemijskih specija, kemijske specije kao zagađivači okoliša. Strukturna područja specijacije (prema izotopnom sastavu (Pb,O,N,C), elektronskim i oksidacijskim stanjima (As,Cr,Fe,Mn,V) specijacija anorganskih spojeva i kompleksa (Al,Ni), specijacija organskih kompleksa i organometalnih spojeva (As,Sb,Se,Sn,Hg), specijacija makromolekulskih spojeva (Cd, Fe, Co, Pt). Metodologija specijacijske analize; Uzorkovanje i obrada uzoraka zraka, voda, bioloških materijala; Vezani sustavi u specijaciji (LC-ICP-MS, GC-ICP-MS, FFF-ICP-MS, CE-ICP, LC-ESI-MS). Frakcioniranje- pristupi i metode. Dinamičko razmatranje specijacijske analize.

ISHODI UČENJA:

1. Objasniti razlike između specijacije, frakcioniranja i analize ukupnog sadržaja analita.
2. Navesti osnovne ciljeve specijacijske analize.
3. Klasificirati područja specijacije prema strukturi promatranih vrsta.
4. Navesti primjere uzorkovanja uzoraka iz okoliša za specijacijske svrhe (zrak, voda tlo, biološki uzorci).
5. Navesti i objasniti osnovne postupke prethodne pripreme uzoraka za specijacijsku analizu.
6. Navesti i objasniti kritične parametre vezanih analitičkih instrumenata u specijaciji (LC-ICP-MS, GC-AAS, GC-ICP-MS, CE-ICP-MS).
7. Usporediti postupke specijacijske analize na primjeru toksikološki značajnih organometalnih specija (Pb, Sn, Hg) i specija prisutnih u različitim oksidacijskim stanjima (As, Cr, Fe).
8. Navesti i usporediti primjere specijacije prema: izotopnom sastavu, elektronskom stanju, anorganskim kompleksima i makromolekulskim spojevima.
9. Prikazati i interpretirati odabrani problem kemijske specijacije temeljem proučavanja recentne znanstvene literature.

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- 1. 1. A.M. Ure, C.M. Davidson, Chemical Speciation in the Environment, 2nd ed. Blackie Academic & Professional, Glasgow, 2002.
- 2. R. Cornelis et al, Handbook of Elemental Speciation: Techniques and Methodology, Book News Inc, Portland, 2004.

Elementna i specijacijska analiza (kolegij izvođen na engleskom jeziku) (172951)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Sanda Rončević
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Sanda Rončević (P, S)

Opis predmeta

Speciation in analytical identification of one or more existing forms of elements determined by isotopic composition, oxidation state, complex or macromolecular structure.

Chemical species in trace range, toxic and essential species, bioavailability and toxicity of species.

Structural aspects of speciation (isotopic composition (Pb,O,N,C), electronic and oxidation states (As,Cr,Fe,Mn,V), inorganic compounds and their complexes(Al,Ni), speciation of organic (As,Sb,Se,Sn,Hg),) and macromolecular compounds (Cd, Fe, Co, Pt).

Methodology of speciation analysis. Sampling, preparation and measurement of species in air, water and biological samples.

Coupled systems in speciation (LC-ICP-MS, GC-ICP-MS, FFF-ICP-MS, CE-ICP, LC-ESI-MS). Fractionation analysis methods. Dynamic aspects of speciation analysis.

Literatura

- Preporučena literatura:
 - R. Cornelis et al. (2004): Handbook of Elemental Speciation: Techniques and Methodology,
 - D.A.Skoog, F.J. Holler, S.R. Crouch (2007): Principles of Instrumental Analysis

Ishodi učenja

1. Acquiring knowledge of theoretical aspects of speciation analysis and modern experimental element analysis
2. Understanding the principles of advanced analytical methodology in environmental assesment

3. Developing of knowledge-based competence necessary for scientific and professional career

Enzimski kataliza u organskoj sintezi (44055)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - doc. dr. sc. Željka Car
- Izvođači:
 - doc. dr. sc. Željka Car (P, S)

Opis predmeta

NASTAVNI SADRŽAJI:

1. Uvod
 - 1.1 Prednosti i nedostaci biokatalizatora
 - 1.2 Svojstva enzima i nomenklatura
2. Uporaba biokatalizatora prema tipu reakcije koju kataliziraju
 - 2.1. Hidrolitičke reakcije
 - 2.1.1. Mehanizmi i kinetika
 - 2.1.2. Hidroliza amida
 - 2.1.3. Hidroliza estera
 - 2.1.3.1. Esteraze i proteaze
 - 2.1.3.2. Lipaze
 - 2.1.4. Hidroliza i sinteza organskih fosfata
 - 2.1.5. Hidroliza epoksida
 - 2.1.6. Hidroliza nitrila
 - 2.2 Reakcije redukcije
 - 2.2.1. Recikliranje kofaktora
 - 2.2.2. Redukcija aldehida i ketona uporabom izoliranih enzima
 - 2.2.3. Redukcija aldehida i ketona uporabom cijelih stanica
 - 2.3. Reakcije oksidacije
 - 2.3.1. Oksidacija alkohola i aldehida
 - 2.3.2. Hidroksiliranje alkana
 - 2.3.3. Hidroksiliranje aromata
 - 2.3.4. Epoksidacija alkena
 - 2.3.5. Baeyer-Villigerova reakcija
 - 2.3.6. Sintaza peroksida
 - 2.4. Nastajanje veze ugljik-ugljik
 - 2.4.1. Aldolna reakcija
 - 2.4.2. Aciloinjska reakcija

- 2.4.3. Michaelove adicije i srodne reakcije
- 2.5. Adicije i eliminacije
 - 2.5.1. Sinteza cijanhidrina
 - 2.5.2. Adicija vode i amonijaka
- 2.6. Transfer glikozila
 - 2.6.1. Glikozil-transferaze
 - 2.6.2. Glikozidaze
- 2.7. Reakcije halogeniranja i dehalogeniranja
 - 2.7.1. Halogeniranje
 - 2.7.2. Dehalogeniranje
- 3. Posebne tehnike
 - 3.1. Enzimi u organskim otapalima
 - 3.1.1. Sinteza estera
 - 3.1.2. Sinteza laktona
 - 3.1.3. Sinteza amida
 - 3.1.4. Sinteza peptida
 - 3.1.5. Sinteza perkiselina
 - 3.1.6. Redoks-reakcije
 - 3.1.7. Variranje otapala
 - 3.2. Imobiliziranje biokatalizatora
 - 3.3. Modificirani i umjetni enzimi
 - 3.3.1. Modificirani enzimi
 - 3.3.2. Polusintetični enzimi
 - 3.3.3. Katalitička protutijela

ISHODI UČENJA:

Navesti osnovna svojstva enzima kao biokatalizatora, usporediti njihove prednosti i nedostatke u odnosu na kemijske katalizatore.

Objasniti osnovne principe enzimske katalize.

Klasificirati enzime prema tipu reakcije koju kataliziraju i predvidjeti koju vrstu biokatalizatora bi koristili u pojedinim (stereo)kemijskim transformacijama.

Predložiti tehnike za optimizaciju selektivnosti enzimske reakcije.

Procijeniti (stereo)kemijski ishod biokatalizirane reakcije.

Primijeniti stečeno znanje o enzimskoj katalizi u organskoj sintezi.

Literatura

• Obavezna literatura:

- 1. K. Faber: Biotransformations in Organic Chemistry, A Textbook, 6. izd., Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2011.

• Preporučena literatura:

- 2. K. Drauz, H. Waldmann (ur.): Enzyme Catalysis in Organic Synthesis, 2. izd., Wiley-VCH, Weinheim, 2002.

Fizikalna anorganska kemija (72801)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Vladimir Stilinović
- Izvođači:
 - dr. sc. Nikola Bedeković (S)
 - prof. dr. sc. Vladimir Stilinović (P)

Opis predmeta

Elektronska i magnetska svojstva atoma i eksperimentalne metode za njihovo proučavanje (fotoelektronska spektroskopija, elektronska paramagnetska rezonancija..). Utjecaj atomske okoline na mjerljiva svojstva - spektroskopske u anorganskoj, metaloorganskoj, organometalnoj i bioanorganskoj kemiji. Metode proučavanja strukture i relativnosti temeljem nuklearnih svojstava (izotopni učinak, nuklearna magnetska rezonancija (^{23}Na , ^{27}Al , ^{113}Cd , ^{195}Pt ...) Mossbauerov učinak i Mossbauerova spektroskopija). Utjecaj relativističkih učinaka na svojstva atoma. Poliatomne vrste: funkcija elektronske gustoće, teorija atoma u molekulama (AIM), osobine kemijske veze, molekulska geometrija, princip gustog pakiranja liganada (LCP). Ioni u otopinama - solvatacija iona, kiselo-bazna svojstva, tvrde i meke kiseline i baze (HSAB). Topljivost krutina: struktura tekuće vode, promjene entalpije i entropije pri otapanju, predviđanje topljivosti krutina temeljem sastava ponašanje iona u nevodenim medijima. Koordinacijski spojevi: ravnoteža u otopinama, koordinacija molekula otapala, kelatni i makrociklički učinci, predviđanje svojstava i kemije temeljem principa HSAB, primjena spektroskopskih metoda na izučavanje kompleksiranja u otopinama i krutinama. Kompleksi s prijenosom naboja. Diagramski prikazi oksidoredukcijske reaktivnosti (specijacijski diagrami: Latimerovi, Frostovi, Pourbaixovi), promjene standardnog redukcijskog potencijala u ovisnosti o okolini (otapalo, eksperimentalni uvjeti) i molekulske strukture (elektron-donorski i akceptorski ligandi, tvrde i meke baze). Molekulska simetrija: elementi teorije grupa, simetrijske grupe točke, polarnost i kiralnost, poopćenje kiralnosti na složenije koordinacijske poliedre eksperimentalne metode proučavanja i određivanja apsolutne konfiguracije (optička rotacijska disperzija cirkularni dikroizam, anomalno raspršenje rentgenskih zraka). Utjecaj molekulske simetrije na simetriju i svojstva kristala.

ISHODI:

Kvantitativno procijeniti svojstva atomâ (radijus, energije ionizacije, elektronski afinitet, elektronegativnost) i jednostavnih iona (radijus, kiselo-bazna svojstva hidratiziranih iona) temeljem elektronske strukture.

Objasniti analizu topologije funkcije elektronske gustoće i povezivati funkciju elektronske gustoće s fizičkim veličinama koje opisuju kemijsku vezu.

Opisati eksperimentalne metode kojima se mogu pratiti pojedina svojstva atoma i molekula.

Predvidjeti geometriju zadane anorganske molekule.

Kvalitativno i kvantitativno opisati entalpijske i entropijske doprinose otapanju (ionskih) kristala

Kvalitativno predvidjeti topljivosti soli temeljem svojstava iona.

Predvidjeti kiselobazna i oksidoredukcijska svojstva tvari temeljem predominacijskih dijagrama

Kvalitativno procijeniti stabilnost spoja temeljem principa tvrdih i mekih kiselina i baza.

Odrediti simetrijsku grupu točke za zadanu molekulu te prepoznati polarne i kiralne molekule.

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- 1. S. F. A. Kettle, *Physical Inorganic Chemistry*, Oxford Univ. Press, 2000. 2. G. Wulfsberg, *Inorganic Chemistry*, University Science Books, Sausalito CA, 2001.

Fizikalna kemija makromolekula (44046)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Davor Kovačević
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Davor Kovačević (P, S)

Opis predmeta

Makromolekule: polimeri, polielektroliti, polisaharidi, proteini, strukturni modeli, konfiguracija lanaca; utjecaj strukture i molarne mase na fizikalno-kemijska svojstva makromolekula. 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. Polimeri u otopini: topljivost, konformacija, nastajanje polielektrolitnih kompleksa. Polimeri na površini: adsorpcija polimera, kinetika adsorpcije, polielektrolitni višeslojevi, polielektrolitne četke.

Ishodi učenja:

Očekuje se da će nakon uspješno položenog ispita studenti moći

1. Opisati osnovne tipove makromolekula (polimeri, polielektroliti, polisaharidi, proteini) i objasniti njihova svojstva
2. Opisati i usporediti metode sinteze polimera.
3. Imenovati i objasniti metode određivanja molarne mase i veličine makromolekula.
4. Izvesti izraze za termodinamičke funkcije stanja za slučaj miješanja polimera i otapala prema Floryjevoj teoriji, te objasniti problem slobodnog volumena.
5. Opisati i objasniti svojstva polielektrolita u otopini.
6. Opisati i objasniti specifičnosti adsorpcije polielektrolita

Literatura:

1. S. F. Sun, Physical Chemistry of Macromolecules: Basic Principles and Issues, 2. izd., Wiley, New York, 2004.
2. P. C. Hiemenz and T. P. Lodge, Polymer Chemistry, 2. izd., CRC Press, Boca Raton, 2007.
3. A. Y. Grosberg and A. R. Khokhlov, Giant Molecules, Academic Press, San Diego, 1997.
4. A. Ravve, Principles of Polymer Chemistry, Plenum Press, New York, 1995.
5. T. Radeva, Physical Chemistry of Polyelectrolytes, Marcel Dekker, New York, 2001.
6. J. Lyklema, Fundamentals of Interface and Colloid Science, Volume V: Soft Colloids, Elsevier, Amsterdam, 2005.

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- 1. S. F. Sun, Physical Chemistry of Macromolecules: Basic Principles and Issues, 2. izd., Wiley, New York, 2004.
- 2. P. C. Hiemenz and T. P. Lodge, Polymer Chemistry, 2. izd., CRC Press, Boca Raton, 2007.

- **Preporučena literatura:**

- 3. A. Y. Grosberg and A. R. Khokhlov, Giant Molecules, Academic Press, San Diego, 1997.
- 4. A. Ravve, Principles of Polymer Chemistry, Plenum Press, New York, 1995.
- 5. T. Radeva, Physical Chemistry of Polyelectrolytes, Marcel Dekker, New York, 2001.
- 6. J. Lyklema, Fundamentals of Interface and Colloid Science, Volume V: Soft Colloids, Elsevier, Amsterdam, 2005.

Fizikalna kemija makromolekula (kolegij izvođen na engleskom jeziku) (172953)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Davor Kovačević
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Davor Kovačević (P)

Opis predmeta

Makromolekule: polimeri, polielektroliti, polisaharidi, proteini, strukturni modeli, konfiguracija lanaca; utjecaj strukture i molarne mase na fizikalno-kemijska svojstva makromolekula. 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. Polimeri u otopini: topljivost, konformacija, nastajanje polielektrolitnih kompleksa. Polimeri na površini: adsorpcija polimera, kinetika adsorpcije, polielektrolitni višeslojevi, polielektrolitne četke.

Ishodi učenja:

Očekuje se da će nakon uspješno položenog ispita studenti moći

1. Opisati osnovne tipove makromolekula (polimeri, polielektroliti, polisaharidi, proteini) i objasniti njihova svojstva
2. Opisati i usporediti metode sinteze polimera.
3. Imenovati i objasniti metode određivanja molarne mase i veličine makromolekula.
4. Izvesti izraze za termodinamičke funkcije stanja za slučaj miješanja polimera i otapala prema Floryjevoj teoriji, te objasniti problem slobodnog volumena.
5. Opisati i objasniti svojstva polielektrolita u otopini.
6. Opisati i objasniti specifičnosti adsorpcije polielektrolita

Literatura:

1. S. F. Sun, Physical Chemistry of Macromolecules: Basic Principles and Issues, 2. izd., Wiley, New York, 2004.
2. P. C. Hiemenz and T. P. Lodge, Polymer Chemistry, 2. izd., CRC Press, Boca Raton, 2007.
3. A. Y. Grosberg and A. R. Khokhlov, Giant Molecules, Academic Press, San Diego, 1997.
4. A. Ravve, Principles of Polymer Chemistry, Plenum Press, New York, 1995.
5. T. Radeva, Physical Chemistry of Polyelectrolytes, Marcel Dekker, New York, 2001.
6. J. Lyklema, Fundamentals of Interface and Colloid Science, Volume V: Soft Colloids, Elsevier, Amsterdam, 2005.

Fizikalna supramolekulska kemija (240408)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - izv. prof. dr. sc. Nikola Bregović
 - prof. dr. sc. Josip Požar
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Josip Požar (P, S)
 - izv. prof. dr. sc. Nikola Bregović (P, S)

Opis predmeta

U okviru kolegija studenti će se ponajprije upoznati s pojmom supramolekulske kemije i dobiti uvid u povijesni razvoj te grane kemije. Pritom će se posebna pažnja posvetiti fizikalno-kemijskom aspektu i pristupu istraživanja supramolekulskih sustava u ranoj fazi razvoja supramolekulske kemije.

Kako bi se omogućilo razumijevanje sadržaja kolegija definirat će se osnovni pojmovi fizikalne kemije: reakcijske termodinamičke veličine (reakcijska entalpija, reakcijska entropija, reakcijska Gibbsova energije), konstanta ravnoteža, konstanta brzine i reda reakcije. Značajna pozornost posvetit će se različitim pristupima određivanju navedenih fizikalno-kemijskih veličina korištenjem kalorimetrijskih, spektroskopskih i elektrokemijskih metoda. Pružit će se uvid u mogućnosti i ograničenja modernih eksperimentalnih tehnika te navesti njihove prednosti i nedostatke u okviru istraživanja supramolekulskih sustava, prvenstveno u otopini.

Obradit će se najvažnije klase supramolekulskih receptora (krunasti eteri, ciklodekstrini, kaliksareni, porfirini, kriptandi, kavitandi, sepulhrati) i supramolekulskih strojeva pri čemu će se posebna pažnja posvetiti odnosu njihove strukture i reaktivnosti, tj. funkcionalnosti.

Naveći će se i obraditi najznačajnije interakcije koje definiraju ishod supramolekulskih reakcija i određuju termodinamičku stabilnost supramolekulskih kompleksa te će se razjasniti čimbenici koji utječu na njihov doprinos termodinamičkim veličinama kompleksiranja.

Objasnit će se temelji molekuskog prepoznavanja, preorganizacije, samoudruživanja te makrocikličkog i kelatnog efekta.

Detaljno će biti obrađen utjecaj otapala na supramolekulske reakcije odnosno odgovarajuće reakcijske veličine te će se razjasniti primjena tih informacija prilikom dizajna supramolekulskih receptora.

Definirat će se pojmovi templatna sinteza i supramolekulska kataliza te obraditi relevantni primjeri odgovarajućih fizikalno-kemijskih (posebice kinetičkih) istraživanja. Predstaviti će se

primjena supramolekulskih sustava u raznim granama kemije i industrije te će se navesti komercijalno iskorišteni receptori, molekulskih i supramolekulski strojevi, razni efikasni transportni sustavi i biomimetici.

Literatura

• Obavezna literatura:

- H. Dodziuk (2002): Introduction to Supramolecular Chemistry
- J.-M. Lehn (1995): Supramolecular Chemistry Concepts and Perspectives
- P. W. Atkins, J. de Paula (2002): Atkins' Physical Chemistry
- C. A. Schalley (ur.) (2007): Analytical Methods in Supramolecular Chemistry

• Preporučena literatura:

- P. J. Cragg (2005): A Practical Guide to Supramolecular Chemistry
- J. W. Steed, J. L. Atwood (2009): Supramolecular Chemistry

Ishodi učenja

1. Nabrojiti i definirati temeljne fizikalno-kemijske veličine relevantne u kontekstu supramolekulske kemije
2. Nabrojiti i objasniti princip rada suvremenih eksperimentalnih tehnika za određivanje termodinamičkih i kinetičkih reakcijskih parametara relevantnih u supramolekularnoj kemiji te navesti njihove prednosti i nedostatke
3. Navesti najčešće tipove interakcija zaslužnih za stabilizaciju supramolekulskih kompleksa uz navođenje primjera spojeva koji ih ostvaruju
4. Objasniti temelje molekulskog prepoznavanja te navesti čimbenike koji definiraju efikasnost i selektivnost receptora
5. Definirati i objasniti pojmove preorganizacija, samoudruživanje, templatna sinteza te makrociklički i kelatni efekt
6. Objasniti princip rada molekulskih strojeva, opisati njihove strukturne značajke, navesti načine njihove kontrole i najvažnije parametre pri njihovoj evaluaciji
7. Predvidjeti na kvalitativnoj razini osnovna svojstva supramolekulskih receptora određene molekulske strukture
8. Predložiti dizajn supramolekulskog receptora željenih svojstava
9. Predložiti pristup eksperimentalnoj karakterizaciji supramolekulskih sustava uz kvalitativni plan provedbe eksperimenta i obrade podataka, vodeći računa o ograničenjima eksperimentalnih tehnika

Fizikalno-kemijske metode istraživanja lijekova (240403)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - izv. prof. dr. sc. Nikola Bregović
 - prof. dr. sc. Josip Požar
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Josip Požar (P, S)
 - izv. prof. dr. sc. Nikola Bregović (P, S)

Opis predmeta

U okviru kolegija Fizikalno-kemijske metode istraživanja lijekova studenti će se upoznati s metodama eksperimentalne fizikalne kemije koje se koriste u istraživanjima farmaceutski aktivnih tvari, ponajviše u otopinama. U tu svrhu, definirat će se fizikalne veličine koje se koriste za opis sastava i svojstava sastojaka farmaceutskih pripravaka (relativni aktivitet i pH vrijednost (koncentracijska i aktivitetna skala), provodnost, topljivost, turbiditet, pK vrijednosti, partijski i distribucijski koeficijenti) i reakcijske termodinamičke i kinetičke veličine relevantne za njihovu stabilnost (standardne reakcijske veličine i konstante ravnoteže, koeficijenti brzine reakcija u homogenim i heterogenim sustavima).

Studenti će se potom upoznati sa sljedećim metodama za određivanje sastava farmaceutskih pripravaka, odnosno za određivanje prethodno navedenih fizikalnih veličina: potencijometrija, spektrofotometrija, konduktometrija, kalorimetrija, spektroskopija NMR.

Naglasak će pritom biti stavljen na opis i svojstva suvremene instrumentacije korištene u svrhu fizikalno-kemijske karakterizacije farmaceutski aktivnih tvari i farmaceutskih pripravaka (dizajn i konstrukcija uređaja, ograničenja i prednosti eksperimentalnih metoda, reproducibilnost i pouzdanost mjerenja) te na obradu izmjerenih eksperimentalnih podataka. Nastava će se temeljiti na znanstvenim pristupu rješavanja problema fizikalno-kemijske karakterizacije farmaceutskih pripravaka što uključuje: odabir eksperimentalne metode za istraživanje i uvjeta (temperatura, sastav, ionska jakost i dr.), metodologija istraživačkog rada (planiranje, provedba i praćenje napretka istraživanja), evaluacija dobivenih rezultata. U tu svrhu studentima će biti prikazani problemi i rezultati vezani uz istraživanja sustava koji sadrže farmaceutski aktivne tvari. Studenti će potom analizirati, prokomentirati i interpretirati odgovarajuće eksperimentalne podatke. Studenti će se također upoznati s najčešće korištenim strategijama stabilizacije farmaceutskih pripravaka (odabir potencijalnih ekscipijensa za stabilizaciju) i načinima ispitivanja utjecaja različitih faktora na njihovu stabilnost.

U okviru seminara rješavat će se računski zadatci i obrađivati eksperimentalni podatci pomoću odgovarajućih računalnih programa.

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- A. T. Florence, D. Attwood (2006): Physicochemical Principles of Pharmacy
- P. W. Atkins, J. de Paula (2002): Atkins' Physical Chemistry

Ishodi učenja

1. Nabrojiti i definirati temeljne fizikalno-kemijske veličine korištene za eksperimentalno istraživanja farmaceutski aktivnih tvari u otopinama
2. Nabrojiti suvremene eksperimentalne tehnike korištene za istraživanja farmaceutski aktivnih tvari u otopinama i objasniti princip njihova rada
3. Navesti objasniti ograničenja i prednosti eksperimentalnih metoda za istraživanja farmaceutski aktivnih tvari i povezati ih s izborom pri istraživanju specifičnih fizikalno-kemijskih svojstava farmaceutskih pripravaka ili njihovih komponenti
4. Isplanirati eksperimente za određivanje fizikalno-kemijskih parametara farmaceutskih pripravaka ili njihovih komponenti (pH, pKa, particijski i distribucijski koeficijent, topljivost i dr.), obraditi odgovarajuće podatke i interpretirati rezultate
5. Predložiti eksperimentalne metode i eksperimentalne uvjete (temperatura, sastav, ionska jakost i dr.) za istraživanje stabilnosti farmaceutski aktivnih tvari uzevši u obzir ograničenjima eksperimentalnih tehnika
6. Predložiti strategiju stabilizacije farmaceutskih pripravaka (odabir potencijalnih ekscipijensa za stabilizaciju) i pristupe ispitivanja utjecaja različitih faktora na njihovu stabilnost

Fizikalno-organska kemija (88324)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - izv. prof. dr. sc. Ivan Kodrin
- Izvođači:
 - izv. prof. dr. sc. Ivan Kodrin (P)
 - Tea Frey, univ. mag. chem. (S)

Opis predmeta

NAČELA FIZIKALNO-ORGANSKE KEMIJE: Teorijska razmatranja, Izotopni efekti, Korelacije strukture i reaktivnosti, Utjecaj otapala, Kiseline i baze, elektrofilni i nukleofilni, Kataliza. ODABRANI REAKCIJSKI MEHANIZMI: Supstitucija na zasićenom atomu ugljika, Participacija susjedne skupine, Reakcije eliminacije, Reakcije adicije, Reakcije karbonilnih spojeva, Nukleofilna i elektrofilna aromatska supstitucija, Pericikličke reakcije.

ISHODI:

Navesti vrste izotopnih efekata, protumačiti njihove uzroke, te opisati uporabu u analizi mehanizama organskih reakcija.

Objasniti temeljne ideje iz korelacije strukture i reaktivnosti.

Objasniti kako otapalo utječe na mehanizme organskih reakcija.

Procijeniti relativne stabilnosti reaktivnih međuprodukata i prijelaznih stanja.

Navesti temeljne mehanizme organskih reakcija i razraditi njihove pojedinosti.

Koristiti alate fizikalno-organske kemije u svrhu detekcije mehanizama reakcija.

Literatura

- Obavezna literatura:
 - N. S. Isaacs (1995): Physical Organic Chemistry
 - R. A. Y. Jones (1984): Physical and Mechanistic Organic Chemistry
 - F. A. Carey i R. J. Sundberg (2000): Advanced Organic Chemistry, Part A: Structure and Mechanisms
 - E. V. Anslyn, D. A. Dougherty (2006): Modern Physical Organic Chemistry

Fotokemija (43994)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - izv. prof. dr. sc. Đani Škalamera
- Izvođači:
 - izv. prof. dr. sc. Đani Škalamera (P)
 - dr. sc. Nikola Basarić (P, S)
 - Alen Martinko, mag. chem. (S)

Opis predmeta

NASTAVNI SADRŽAJI:

Međudjelovanje supstancije i elektromagnetskog zračenja

Kvantni prinos

Elektronski spektri

Pobuđena stanja, emisijski spektri i preraspodjela energije

Plohe potencijalne energije u fotokemijskim procesima

Reakcijski međuprodukti u fotokemijskim reakcijama

Radikali

Biradikali

Karbeni i nitreni

Propelani, tetraedrani i antiaromatske molekule

Cikloalkini

Pregled važnijih fotokemijskih reakcija

Fotoredukcije

Fotooksidacije

Fotodimerizacije

Fotoizomerizacije

Fotodisocijacije

Fotoreakcije karbonilnih spojeva

Fotoreakcije alkohola

Fotoreakcije peroksida

Fotoreakcije nitrita

Fotoreakcije amida i amina

Fotoreakcije prijenosa elektrona

Radikalske nukleofilne supstitucije

ISHODI UČENJA:

Očekuje se da studenti nakon odslušanog i položenog kolegija mogu:

- klasificirati organske fotoreakcije
- razumijeti prirodu reakcijskih međuprodukata koji se pojavljuju u fotoreakcijama
- prepoznati reakcijske mehanizme u fotoreakcijama
- steći vještinu u primjeni fotoreakcija u organskoj sintezi

OBAVEZNA LITERATURA

1. J. Kagan, Organic Photochemistry, Academic Press, London 1993.
2. N. J. Turro: Modern Molecular Photochemistry of Organic Molecules, Univ. Science Books, Sausalito 2005.
3. J. Michl, V. Bonacic Koutecky: Electronic Aspects of Organic Photochemistry, Wiley, New York 1991.

DODATNA LITERATURA

4. K. Wentrup: Reactive Molecules, Wiley, New York 1984.

Literatura

• Obavezna literatura:

- 1. J. Kagan, Organic Photochemistry, Academic Press, London 1993.
- 2. N. J. Turro: Modern Molecular Photochemistry of Organic Molecules, Univ. Science Books, Sausalito 2005.
- 3. J. Michl, V. Bonacic Koutecky: Electronic Aspects of Organic Photochemistry, Wiley, New York 1991.

• Preporučena literatura:

- 4. K. Wentrup: Reactive Molecules, Wiley, New York 1984.

Ishodi učenja

1. - klasificirati organske fotoreakcije
2. - razumijeti prirodu reakcijskih međuprodukata koji se pojavljuju u fotoreakcijama
3. - prepoznati reakcijske mehanizme u fotoreakcijama
4. - steći vještinu u primjeni fotoreakcija u organskoj sintezi

Genetičko i proteinsko inženjerstvo (43980)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - izv. prof. dr. sc. Jasmina Rokov Plavec
- Izvođači:
 - izv. prof. dr. sc. Jasmina Rokov Plavec (P, S)

Opis predmeta

NASTAVNI SADRŽAJI:

Temeljni pojmovi manipulacije genima. Restriksijski enzimi. Metode povezivanja molekula DNA. PCR (lančana reakcija polimerazom) - metode i primjena. Unos rekombinantne DNA u stanicu. Osnovna svojstva vektora za kloniranje DNA. Vrste vektora: plazmidi, bakteriofag lambda, vektori za kloniranje velikih molekula DNA. Strategije kloniranja. Kloniranje genom-ske DNA. Kloniranje cDNA. Strategije pretraživanja. Sekvenciranje DNA. Kratki osvrt na genomiku, transkriptomiku i proteomiku. Bakterijski i eukariotski sustavi za prekomjernu ekspresiju proteina. Metode pročišćavanja proteina. Osnove proteinskog inženjerstva. Mutageneza in vitro (ciljana i nasumična). Usmjerena evolucija. Prikaz proteina na česticama faga (engl. phage display). Fluorescentni proteini. Transkripcija i translacija in vitro. Transgenične biljke i životinje. Primjena tehnologije rekombinantne DNA. Etička pitanja vezana uz manipulaciju gena.

Na seminarima će se razrađivati problemski zadaci, te diskutirati primjeri iz istraživačke, odnosno laboratorijske prakse. Pojedini studenti prezentirat će najnovija dostignuća iz odabranih područja genetičkog i proteinskog inženjerstva.

IZVOĐAČI KOLEGIJA:

Predavanja: Jasmina Rokov Plavec (JR027)

Seminar: Jasmina Rokov Plavec (JR027)

LITERATURA

Obavezna:

1. D. L. Nelson, M. M. Cox. Lehninger principles of biochemistry. 6. izd., W. H. Freeman & Co. New York 2013.
2. S.B. Primrose, R.M. Twyman. Principles of Gene Manipulation and Genomics, 7. izd. Blackwell Publishing 2006.
3. Odabrani znanstveni radovi s najnovijim dostignućima u području genetičkog i proteinskog inženjerstva

Dopunska:

1. J. Sambrook, D.W. Russell. Molecular Cloning: a laboratory manual, 3. izd. Cold Spring Harbor Laboratory Press 2001.

2. S. Brakmann, K. Johnsson. Directed Molecular Evolution of Proteins. Wiley-VCH 2002.

ISHODI UČENJA:

1. objasniti i predložiti postupke u kloniranju gena
2. objasniti i predložiti postupke koji omogućuju prekomjernu ekspresiju i pročišćavanje rekombinantnih proteina
3. navesti i objasniti metode proteinskog inženjerstva kojima se dobivaju promijenjeni i/ili poboljšani proteini
4. objasniti i usporediti genomička, transkriptomička i proteomička istraživanja
5. objasniti i predložiti metode za praćenje proteinskih interakcija
6. navesti i objasniti tehnike manipulacije genima u bakterijama i eukariotskim organizmima uključujući dobivanje transgeničnih organizama
7. navesti i objasniti primjenu genetičkog i proteinskog inženjerstva u biotehnologiji i medicini
8. prikazati originalni znanstveni rad u obliku usmenog priopćenja

Literatura

• Obavezna literatura:

- D.L. Nelson, M.M. Cox (2021): Lehninger Principles of Biochemistry
- S.B. Primrose, R.M. Twyman. (2006): Principles of Gene Manipulation and Genomics
- razni autori: Odabrani znanstveni radovi s najnovijim dostignućima u području genetičkog i proteinskog inženjerstva

• Preporučena literatura:

- J. Sambrook, D.W. Russell. (2001): Molecular Cloning: a laboratory manual
- S. Brakmann, K. Johnsson. (2002): Directed Molecular Evolution of Proteins

Ishodi učenja

1. objasniti i predložiti postupke u kloniranju gena
2. objasniti i predložiti postupke koji omogućuju prekomjernu ekspresiju i pročišćavanje rekombinantnih proteina
3. navesti i objasniti metode proteinskog inženjerstva kojima se dobivaju promijenjeni i/ili poboljšani proteini
4. objasniti i usporediti genomička, transkriptomička i proteomička istraživanja
5. objasniti i predložiti metode za praćenje proteinskih interakcija
6. navesti i objasniti tehnike manipulacije genima u bakterijama i eukariotskim organizmima uključujući dobivanje transgeničnih organizama

7. navesti i objasniti primjenu genetičkog i proteinskog inženjerstva u biotehnologiji i medicini
8. prikazati originalni znanstveni rad u obliku usmenog priopćenja

Genomika i bioinformatika (128620)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - doc. dr. sc. Marko Močibob
- Izvođači:
 - doc. dr. sc. Marko Močibob (P, S)

Opis predmeta

Teorijski dio:

Baze podataka: tipovi baza podataka i organizacija baza podataka. "Flat" i relacijske baze podataka. Osnovni bioinformatički resursi u bioinformatici i genomici. Poravnavanje proteinskih i nukleotidnih slijedova. Pretraga baza podataka prema sličnosti sa zadanom sekvencom: BLAST i FASTA. Motivi u aminokiselinskim slijedovima, profili i proteinske porodice. Osnove molekularne evolucije i filogenetska analiza.

Računalna biologija genomskih projekata: Strategije sekvenciranja i algoritmi za sklapanje sekvence. Dokumentacija (annotation) genoma: genske ontologije. Vizualizacija sadržaja genoma. Generiranje znanstvenih hipoteza uz pomoć genomike

Preglednici genoma. UCSC Genome Browser i Ensembl Genome Browser. Pronalaženje sekvenci, funkcionalnih elemenata i dokumentacije pojedinih gena.

Struktura i sastav genoma. Genomi bakterija i arhea. Eukariotski genomi i paradoks C-vrijednosti. Ljudski genom, genomske varijacije i nasljedne bolesti.

Funkcionalna genomika i transkriptomika. Analiza ekspresije gena na mikročipovima DNA (DNA microarrays) i metodama sekvenciranja sljedeće generacije (RNA-seq).

Praktična nastava u računalnoj učionici:

Praktična nastava problemski orijentiranog učenja, tutoriala i strukturirane rasprave o gradivu koje se svladava. Studenti dobijaju teorijsku pozadinu korištenih metoda i objašnjenje znanstvene motivacije kroz teorijska predavanja. Studenti samostalno rješavaju praktične zadatke vođeni prethodno pripremljenim pisanim materijalima, pomoću alata koji su slobodno dostupni na Internetu. Nastavnik moderira i usklađuje rješavanje zadataka, potiče studente na raspravu i donošenje zaključaka. Sadržaj praktičnih vježbi:

Upoznavanje s različitim vrstama baza podataka (aminokiselinskih i proteinskih slijedova, bibliografske baze podataka, baze podataka dostupne na serverima European Bioinformatics Institute, National Center for Biotechnology Information, i druge). Pretraživanje baza podataka prema ključnim riječima, filtriranje rezultata pretraživanja i korištenje složenih upita u pretraživanju. Pretraživanje aminokiselinskih slijedova BLAST-om, izrada profila i pretraživanje PSI-BLAST-om.

Analiza aminokiselinskih sekvenci poravnavanjem, interpretacija i evaluacija poravnavanja slijedova. Filogenetska analiza i izrada filogenetskog stabla različitim metodama evolucijske udaljenosti (Neighbour-Joining) i molekulske evolucije (Maximal Parsimony, Maximal likelihood). Analiza pouzdanosti filogenetskog stabla bootstrap-analizom.

Pristup i pronalaženje osnovnih informacija o sekvenciranim genomima. Pretraživanje i analiza eukariotskih genoma pomoću Ensembl Genome Browser. Pronalazak gena od interesa, analiza transkripata mapiranih na ciljnu genomsku regiju. Komparativna genomika, poravnavanje kromosoma i detekcija sintenije između različitih mikrobijskih i eukariotskih organizama.

Studentski seminari:

Manji dio gradiva biti će obrađen i prezentiran od strane studenata, a obuhvaćati će recentna dostignuća na području bioinformatike i genomike. Zainteresirani studenti obraditi će zadanu temu koristeći primarnu literaturu (znanstvene članke)

Terenska nastava:

Planirana je posjeta istraživačkim grupama pri Sveučilištu u Zagrebu ili Institutu Ruđer Bošković koje se bave istraživanjima na području genomike i bioinformatike.

Ishodi učenja:

Navesti i opisati najčešće korištene baze podataka u bioinformatici.

Pronaći aminokiselinski slijed proteina od interesa i dostupne informacije vezane uz taj protein.

Pronaći homologe zadanog proteina, procijeniti pouzdanost rezultata pretrage.

Napraviti poravnavanje aminokiselinskih slijedova homolognih proteina, analizirati kvalitetu i pouzdanost poravnavanja, konstruirati filogenetsko stablo.

Opisati nekoliko metoda sekvenciranja DNA sljedeće generacije i usporediti ih međusobno, te sa Sangerovom metodom sekvenciranja DNA.

Navesti i objasniti strategije sekvenciranja jednostavnih mikrobijskih i složenih eukariotskih genoma.

Opisati postupke anotacije genoma.

Usporediti metode analize ekspresije gena na mikročipovima DNA i sekvenciranjem RNA na platformama za sekvenciranje sljedeće generacije.

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- Jonathan Pevsner (2015): Bioinformatics and Functional Genomics

- **Preporučena literatura:**

- Marketa Zvelebil, Jeremy O. Baum (2007): Understanding Bioinformatics, 1st ed.

Heterociklička kemija (72825)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Ines Primožič
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Ines Primožič (P)
 - Alma Ramić, dr. sc. (S)

Opis predmeta

NASTAVNI SADRŽAJI:

Zasićeni i nezasićeni heterocikli: strukturni tipovi, nomenklatura, reaktivnost, anomerni efekt, tautomerija kod aromatskih heterocikla. Strategije za formiranje prstena: ciklizacijske reakcije, cikloadicijske reakcije (1,3-dipolarna cikloadicija, Diels-Alderova reakcija, itd.). Šesteročlani heterocikli s jednim heteroatomom u prstenu: piridini, kinolini i izokinolini. Sinteze heterocikličkih sustava. Peteročlani heterocikli s jednim heteroatomom u prstenu: piroli, furani, tiofeni, indoli i srodni spojevi, benzofurani. Sinteze heterocikličkih sustava. Šesteročlani heterocikli s dva ili više heteroatoma u prstenu: pirimidini, diazini, triazini i tetrazini, oksazini i tiazini. Sinteze heterocikličkih sustava. Peteročlani heterocikli s dva ili više heteroatoma u prstenu: imidazoli, pirazoli, triazoli i tetrazoli, oksazoli, tiazoli i njihovi benzo derivati. Sinteze heterocikličkih sustava. Purini. Sinteze heterocikličkih sustava. Heterocikli u biokemiji i medicini.

ISHODI UČENJA:

- razlikovati strukture najvažnijih aromatskih heterocikličkih sustava i opisati njihova svojstva;
- usporediti strukturu heterocikličkih spojeva i njihovu kemijsku reaktivnost;
- primijeniti temeljna znanja organske kemije u sintezi heterocikla;
- protumačiti opće postupke sinteza i mehanizme reakcija heterocikla;
- primjeniti suvremene metode kemijske sinteze u totalnoj sintezi bioaktivnih heterocikličkih spojeva;
- prezentirati znanstvene sadržaje pismeno i usmeno.

Literatura

- Obavezna literatura:

– 1. OBVEZNA LITERATURA:

Julio Alvarez Builla, Juan Jose Vaquero, Jose Barluenga Editors(s): Modern Heterocyclic Chemistry, Wiley VCH Verlag GmbH Co. KGaA, 2011.

J. A. Joule, K. Mills, Heterocyclic Chemistry, 5. izdanje, Blackwell Science, 2010.

T.L. Gilchrist, Heterocyclic Chemistry, 3rd edition, Longmann, 1997.

• **Preporučena literatura:**

– 2. DOPUNSKA LITERATURA:

revijalni članci i znanstvene monografije

Instrumentna analitika 1 (43971)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: obavezni
- Semestar: 1

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Sanda Rončević
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Sanda Rončević (P)
 - Nikolina Ilić, mag. chem. (S)

Opis predmeta

NASTAVNI SADRŽAJ:

Spektrometrijske metode u analitici, komponente optičkih spektrometara, interferometri, izvori zračenja, detektori; Temeljne značajke instrumenata u atomskoj spektrometriji, tehnike plamene i elektrotermičke apsorpcijske spektrometrije, plamena fotometrija, optička spektrometrija i spektrometrija masa temeljena na plazma izvorima, električna iskra i luk, izvori tinjajućeg izboja, atomska i rendgenska fluorescencija; Temeljne značajke instrumenata u molekularnoj spektrometriji, spektrofotometrija u ultraljubičastom i vidljivom dijelu spektra, tehnike vibracijske spektroskopije u infracrvenom dijelu spektra, Ramanova spektroskopija, luminescencijske tehnike; Prednosti i nedostaci instrumentacije u specifičnim analitičkim zahtjevima; Razvoj i primjena posebnih instrumentnih tehnika (lasersko otparavanje LA, generiranje hidrida HG, injektiranje u protok FIA, tehnika hladne pare CV, automatizacija).

ISHODI UČENJA:

1. Navesti temeljne komponente optičkih spektrometara
2. Opisati glavne značajke izvora zračenja u optičkom području
3. Usporediti značajke i funkcije fotonskih i termičkih detektora
4. Klasificirati instrumentne analitičke metode prema vrsti interakcije zračenja i tvari
5. Navesti i objasniti analitičke značajke emisijskih metoda (plamena fotometrija, spektrometrije uz plazma izvore i tinjajuće izboje)
6. Navesti i objasniti analitičke značajke apsorpcijskih metoda atomske spektrometrije (plamena i elektrotermička tehnika)
7. Opisati temeljne značajke konstrukcije instrumenata za kvantitativu analizu u molekularnoj spektrometriji (UV/VIS spektrofotometrija, fluorimetrija)
8. Navesti i objasniti temeljne konstrukcijske značajke disperzijskih i bezdisperzijskih instrumenata u vibracijskoj spektroskopiji (IR, Raman)
9. Usporediti prednosti i nedostatke analitičkih instrumenata u karakterizaciji jednostavnih i složenih uzoraka

10. Predložiti izbor instrumentnih metoda za analizu sadržaja, reaktivnosti i strukture tvari u odabranim analitičkim zahtjevima

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- 1. 1. D. A. Skoog, F. J. Holler, S. R. Crouch, Principles of Instrumental Analysis, 6th Ed., Thomson Brooks/Cole, Belmont, USA, 2007.

- **Preporučena literatura:**

- 2. 1. S. J. Hill, Inductively Coupled Plasma Spectrometry and its Applications, Blackwell Publishing Ltd. Oxford, 2007.
- 2. A. Sanz-Medel, R. Pereiro, Atomic Absorption spectrometry: An Introduction, 2nd Ed., Momentum Press, 2014.
- 3. J. D. Ingle, S.R. Crouch, Spectrochemical Analysis, Prentice-Hall International Inc, Englewood Cliffs, 1988.
- 4. R. Kellner et al., Analytical Chemistry, Wiley-VCH, Weinheim, 1998.

Instrumentna analitika 2 (43975)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: obavezni
- Semestar: 2

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Nives Galić
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Nives Galić (P, S)

Opis predmeta

ISHODI:

Objasniti principe spektrometrije masa.

Usporediti ionske izvore te analizatore masa.

Interpretirati spektre masa.

Objasniti kromatografske tehnike (plinsku, tekućinsku i fluidnu kromatografiju pri superkritičnim uvjetima).

Interpretirati kromatogram.

Objasniti imunoanalitičke metode kvalitativne i kvantitativne analize.

Odabrati imunoanalitičku metodu određivanja obzirom na količinu analita.

Objasniti principe rada kemijskih senzora.

Objasniti određivanje iona potenciometrijskim metodama u uzorcima složenog sastava.

Odabrati odgovarajuću instrumentalnu tehniku i metodu za kvalitativnu i/ili kvantitativnu analizu različitih uzoraka.

NASTAVNI SADRŽAJI:

Spektrometrija masa: osnovni principi, ionski izvori, analizatori masa, identifikacija malih molekula, identifikacija makromolekula.

Kromatografija: osnovni principi, plinska kromatografija, tekućinska kromatografija, fluidna kromatografija pri superkritičnim uvjetima, kromatografske kolone, detektori, GC-MS, LC-MS, primjena.

Imunoanaliza: osnovni principi, imunoanalitičke metode - precipitacija, aglutinacija, inhibicija aglutinacije, fluoroimunoanaliza, radioimunoanaliza i enzimski imunoanaliza.

Enzimski analiza: značajke enzima kao analitičkih reagenasa, stehiometrijske metode određivanja supstrata, određivanje supstrata, enzima, aktivatora i inhibitora enzima mjerenjem brzine reakcije.

Kemijski senzori: osnovni principi, potenciometrijski senzori, optode i biosenzori.

Literatura

• Obavezna literatura:

- 1. D. A. Skoog, F. J. Holler, T. A. Nieman: Principles of Instrumental Analysis, Harcourt College Publishers, Philadelphia, 1998. 2. N. Galić: Imunoanalitičke metode, skripta, Zavod za analitičku kemiju, Kemijski odsjek, PMF, Zagreb, 2003. 3. N. Galić: Spektrometrija masa, skripta, Zavod za analitičku kemiju, Kemijski odsjek, PMF, Zagreb, 2004. 4. N. Galić, V. Drevenkar: Kromatografija, skripta, Zavod za analitičku kemiju, Kemijski odsjek, PMF, Zagreb, 2005.
- 2. N. Galić: Spektrometrija masa, interna skripta, KO PMF, Zagreb, 2004.
- 3. N. Galić, V. Drevenkar: Kromatografija, skripta, KO PMF, Zagreb, 2005.
- 4. R. Kellner, J. M. Mermet, M. Otto, H. M. Widmer: Analytical Chemistry, Wiley, Weinheim, 1998.
- 5. D. A. Skoog, F. J. Holler, T. A. Nieman: Principles of Instrumental Analysis, Harcourt College Publishers, Philadelphia, 1998.

Instrumentne metode izučavanja tvari u čvrstom stanju (72803)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Biserka Prugovečki
 - prof. dr. sc. Željka Soldin
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Željka Soldin (P, S)
 - prof. dr. sc. Biserka Prugovečki (P, S)

Opis predmeta

NASTAVNI SADRŽAJ:

Svojstva čvrstog stanja. Metode karakterizacije tvari u čvrstom stanju i njihova primjena: elementna analiza, spektroskopske metode, termička analiza, difrakcijske metode, mikroskopske metode. Kriteriji za odabir odgovarajuće metode. Priprava realnih uzoraka za postupak analize. Kristalizacija i postupci pripreme jediničnih kristala. Spektroskopske metode analize: IR spektroskopija, Ramanova spektroskopija, UV/VIS spektroskopija, rentgenska fluorescencija. Termička analiza: termogravimetrija, diferencijalna termička analiza, diferencijalna pretražna kalorimetrija. Difrakcija rentgenskog zračenja na jediničnom kristalu, određivanje struktura novih materijala. Difrakcija rentgenskog zračenja na polikristalnom uzorku: kvalitativna i kvantitativna fazna analiza, rentgensko raspršenje pod malim kutom. Karakterizacija tankih filmova rentgenskim metodama. Neutronska difrakcija. Mikroskopske metode: optička mikroskopija, transmisijska elektronska mikroskopija (TEM), pretražna elektronska mikroskopija (SEM). Seminar: primjena različitih instrumentnih metoda izučavanja tvari u čvrstom stanju u tipičnom okruženju (industrija, istraživačke institucije).

ISHODI UČENJA:

Nakon odslušanog kolegija studenti će:

1. prepoznati i objasniti sličnosti i razlike među različitim klasama spojeva u čvrstom stanju
2. objasniti interakciju zračenja s čvrstim tvarima
3. usvojiti teorijske osnove različitih analitičkih tehnika koje se koriste za karakterizaciju tvari u čvrstom stanju
4. biti u mogućnosti prema zahtjevima analitičkog problema odabrati odgovarajuću analitičku metodu
5. moći procijeniti prednosti i ograničenja različitih tehnika
6. smisleno analizirati i prikazati rezultate mjerenja

7. znati primijeniti različite instrumentne metode izučavanja tvari u čvrstom stanju u tipičnom okruženju (industrija, istraživačke ustanove)

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- 1. 1. A. R. West, Basic Solid Solid State Chemistry, 2nd Ed., John Wiley & Sons, New York, 1999.
- 2. 2. S. Ahuja and N. Jespersen (Eds), Comprehensive Analytical Chemistry: Modern Instrumental Analysis, Volume 47, Elsevier, Oxford, 2006.

Istraživački projekt iz kemije (kolegij izvođen na engleskom jeziku) (295343)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 20.0
- Sati nastave: 10(S) + 100(V)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji: NEMA PODATAKA
- Izvođači: NEMA PODATAKA

Opis predmeta

NEMA PODATAKA

Kemija materijala (43986)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Ernest Meštrović
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Ernest Meštrović (P)
 - doc. dr. sc. Edi Topić (P, S)

Opis predmeta

Uvod i kratki povijesni osvrt. Odnos struktura-svojstvo i uređenost-neuređenost kao osnova za pripremu materijala željenih svojstava. Morfologija i veličina čestica kao parametri koji određuju svojstva materijala. Sistematika materijala: metalna stakla, tanki filmovi, visokotemperaturni supravodiči, kompozitni materijali, silikatni materijali (s posebnim naglaskom na zeolite), materijali za pohranu i transport energije i informacija te molekularni vodiči. Postupci pripreme. Metode analize materijala. Odnos materijala i okoliša. Smjerovi istraživanja u područjima materijala i nanotehnologije.

ISHODI UČENJA: 1. Podijeliti materijale u skupine koje se temelje na svojstvima i strukturi tvari 2. Navesti svojstva materijala koja se mogu izračunati/predvidjeti na temelju poznavanja kristalnih struktura 3. Predložiti metode koje se koriste za određivanje raspodjele veličine i oblika čestica 4. Objasniti ishodište mehaničkih, termičkih, optičkih, magnetskih i eklektičnih svojstava 5. Iskoristiti poznavanje kinetičkih procesa u tumačenju starenja materijala te odrediti životni ciklus materijala 6. Usporediti klasične metode pripreme materijala s postupcima pripreme funkcionalnih materijala 7. Poznavanje osnovnih postavki intelektualnog vlasništva kao i procesa prijave i dobivanja patenata

Literatura

- Obavezna literatura:
 - 1. W. D. Callister, Materials Science and Engineering, Wiley, Chichester, 2000. 2. P. J. van der Put, The Inorganic Chemistry of Materials, Plenum Press, New York, 1998. 3. J. C. Anderson, K. D. Leaver, R. D. Rawlings, J. M. Alexander, Materials Science, Van Nostrand Reinhold, 1985. 4. A. K. Cheetham, P. Day, Solid-State Chemistry-Techniques, Clarendon Press, Oxford, 1987. 5. J. J. Gerstein and F. W. Smith, The physics and chemistry of materials, John Wiley and sons, Inc 2001.

- 2. Paul J. Van der Put, The Inorganic Chemistry of Materials, Plenum Press, New York 1998.
- 3. J.C. Anderson, K. D. Leaver, R. D. Rawlings, J. M. Alexander, Materials Science, Van Nostrand Reinhold 1985.
- 4. A. K. Cheetham, P. Day, Solid-State Chemistry-Techniques, Clarendon Press, Oxford 1987.

Kemija molekulskih krutina (72806)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Dominik Cinčić
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Dominik Cinčić (P)
 - doc. dr. sc. Vinko Nemec (S)

Opis predmeta

SADRŽAJ:

Molekulski kristali: simetrija kristala, princip gustog pakiranja, koeficijent Kitajgorodskog, struktura i konformacija molekula. Međumolekulske interakcije u čvrstom stanju: Van der Waalsovi kontakti, polarne interakcije, vodikove veze, halogenske veze. Topologija međumolekulskog povezivanja i topološki deskriptori. Kristalizacija: prezasićenje i metastabilno stanje otopine, nukleacija, rast kristala, metode kristalizacije. Polimorfija: termodinamička i kinetička kontrola, nukleacija polimorfa, fazno pravilo, metastabilne forme, fizička i kemijska svojstva polimorfa. Izomorfija, amorfija i izostrukturnost. Višekomponentni sustavi: solvati, soli, kokristali, fizička i kemijska svojstva, primjena. Reakcije u čvrstom stanju: mehanokemijska sinteza (mljevenje sa i bez prisustva tekuće faze), sinteza pomoću mikrovalnog zračenja, fotokemijska sinteza i reakcije u jediničnom kristalu.

ISHODI UČENJA:

1. Razlikovati ionske, kovalentne i molekulske kristale.
2. Objasniti poredak međumolekulskih sila prema jakosti, dosegu i usmjerenosti.
3. Prepoznati topologiju međumolekulskog povezivanja jednostavnih/zadanih sustava i napisati izraz za motiv međumolekulskog povezivanja prema teoriji grafova.
4. Objasniti pojmove: kokristal, sol, solvat, hidrat.
5. Razlikovati metode kristalizacije molekulskih kristala iz otopine.
6. Objasniti pojmove polimorfija i izomorfija.
7. Navesti i opisati metode mehanokemijske sinteze u čvrstom stanju.
8. Razlikovati pojmove: kovalentna i supramolekulska mehanosinteza.
9. Razlikovati pojmove: reakcija bez prisustva otapala, reakcija starenjem, reakcija mljevenjem.
10. Održati kratko izlaganje na zadanu (ili samostalno odabranu) temu iz područja kemije molekulskih kristala.

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- 1. 1. D. Braga i F. Grepioni, Making Crystals by Design: Methods, Techniques and Applications, Wiley-VCH, Weinheim, 2007. 2. G. S. Rohrer, Structure and Bonding in Crystalline Materials, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2006. 3. G. R. Desiraju, Crystal Engineering: The Design of Organic Solids, Elsevier, Amsterdam, 1989.

Kemija prirodnih organskih spojeva (44051)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - izv. prof. dr. sc. Nikola Cindro
- Izvođači:
 - Mirko Duvnjak, univ. mag. chem. (S)
 - izv. prof. dr. sc. Nikola Cindro (P)

Opis predmeta

NASTAVNI SADRŽAJI:

Ugljikohidrati. Strukturni tipovi, nomenklatura te stereokemija monosaharida. Izvori i funkcije. Kemija monosaharida. Reakcije hidroksilnih skupina. Reakcije na anomernom centru. Glikozidi. Nastajanje i hidroliza glikozida. Povećanje i skraćivanje monosaharidnog lanca. Oligosaharidi i polisaharidi. Određivanje strukture i sinteza oligosaharida. Strukturne karakteristike i biološka svojstva (glikogen, škrob, celuloza, hitin). Nukleozidi, nukleotidi i polinukleotidi. Konformacija, sinteza i biosinteza nukleozida. Nukleotidi. Sinteza i biosinteza nukleotida. Oligo- i polinukleotidi. Sinteza i biosinteza oligo- i polinukleotida. Aminokiseline i proteini; Kiselobazna svojstva i stereokemija aminokiselina. Reakcije aminokiselina in vivo i in vitro. Sinteze aminokiselina. Resolucija racemične smjese aminokiselina. Enantioselektivne sinteze aminokiselina. Peptidi i proteini. Sinteze peptida i proteina. N-zaštitne skupine. C-zaštitne skupine. Aktiviranje i spajanje-sinteza peptida na krutoj fazi. Neki specifični linearni i ciklički peptidi i proteini. Terpenoidi. Općeniti putovi biogeneze. Određivanje strukture terpenoida. Monoterpenoidi. Seskviterpenoidi. Diterpenoidi. Triterpenoidi. Tetraterpenoidi. Poliizoprenoidi. Steroidi. Kolesterol. Žučne kiseline. Spolni hormoni. Saponini. Vitamin D. Fitosteroli. Stereokemija, biosinteza, kemijske sinteze i transformacije. Lipidi. Struktura masnih kiselina. Biosinteza. Kemijske sinteze. Prostaglandini. Strukture, biosinteza i sinteze. Tromboksani i leukotrieni. Polifenoli. Strukturni tipovi. Dolaženje u prirodi. Izolacija i određivanje strukture. Biosinteza. Laboratorijska sinteza. Alkaloidi. Strukturne karakteristike. Dolaženje u prirodi. Izolacija i određivanje strukture. Biosinteza. Alkaloidi iz ornitina i lizina. Alkaloidi iz fenilalanina i tirozina. Alkaloidi iz triptofana. Sinteze alkaloida.

ISHODI UČENJA:

- opisati strukturu prirodnih organskih spojeva i objasniti njihova fizikalna i kemijska svojstva;
- usporediti strukturu prirodnih organskih spojeva i njihovu kemijsku reaktivnost;
- protumačiti važne biokemijske procese skupina biološki aktivnih sekundarnih metabolita;
- primijeniti temeljna znanja organske kemije u planiranju sinteze prirodnih organskih spojeva;

- primjeniti suvremene metode sinteze u totalnoj sintezi bioaktivnih prirodnih organskih spojeva;
- objasniti mehanizme reakcija, posebice stereoselektivne pripreve kiralnih prirodnih organskih spojeva;
- prezentirati znanstvene sadržaje pismeno i usmeno.

Literatura

J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, P. Wothers, Organic Chemistry, 2 izdanje, Oxford University Press, 2012. P. M. Dewick, Medicinal Natural Products. A Biosynthetic Approach. 3. izdanje, Chichester, John Wiley & Sons, 2009. K. C. Nicolaou, E. J. Sorensen, Classics in Total Synthesis: Targets, Strategies, Methods. Wiley 1996. 4. K. C. Nicolaou, S. A. Snyder, Classics in Total Synthesis II: More Targets, Strategies, Methods. Wiley 2003.

Literatura

• Obavezna literatura:

- 1. J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, P. Wothers, Organic Chemistry, 2 izdanje, Oxford University Press, 2012.
P. M. Dewick, Medicinal Natural Products. A Biosynthetic Approach. 3. izdanje, Chichester, John Wiley & Sons, 2009.
K. C. Nicolaou, E. J. Sorensen, Classics in Total Synthesis: Targets, Strategies, Methods. Wiley 1996.
- 4. K. C. Nicolaou, S. A. Snyder, Classics in Total Synthesis II: More Targets, Strategies, Methods. Wiley 2003.

• Preporučena literatura:

- 2. S. H. Pine, Organska kemija, Školska knjiga 1994.
J. Mann, R. S. Davidson, J. B. Hobbs, D. V. Banthorpe and J. B. Harborne, Natural Products, Their Chemistry and Biological Significance, Longman, 1996.

Ishodi učenja

1. - opisati strukturu prirodnih organskih spojeva i objasniti njihova fizikalna i kemijska svojstva;
- usporediti strukturu prirodnih organskih spojeva i njihovu kemijsku reaktivnost;
 - protumačiti važne biokemijske procese skupina biološki aktivnih sekundarnih metabolita;
 - primijeniti temeljna znanja organske kemije u planiranju sinteze prirodnih organskih spojeva;
 - primjeniti suvremene metode sinteze u totalnoj sintezi bioaktivnih prirodnih organskih spojeva;
 - objasniti mehanizme reakcija, posebice

Kemija čvrstog stanja (43985)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Marijana Đaković
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Marijana Đaković (P)
 - dr. sc. Mateja Pisačić (S)

Opis predmeta

Ishodi učenja:

1. Objasniti teoriju metala i poluvodiča.
2. Opisati supravodljivost. Sintetizirati keramički supravodič i pokazati levitaciju.
3. Objasniti termoelektrične efekte i navesti primjenu takvih materijala.
4. Objasniti magnetska svojstva i navesti primjenu magnetskih materijala.
5. Objasniti optička svojstva. Pokazati centre boje ozračivanjem nekih halogenida rentgenskim zračenjem.
6. Opisati kristalne fefekte i objasniti difuziju i ionsku vodljivost u čvrstom stanju.
7. Opisati binarne i ternarne fazne dijagrame. Računati udjele i sastave komponenata iz binarnog faznog dijagrama.
8. Objasniti fazne transformacije. Pokazati fazni prijelaz na primjeru jednog spoja.
9. Navesti osnovne metode sinteze u čvrstom stanju.
10. Opisati intersticijske faze i refraktorije i objasniti njihovu strukturu i svojstva.
11. Opisati amorfne materijale i objasniti načine njihovog dobivanja. Načiniti obojeno staklo.
12. Opisati osnovne vrste cementa i objasniti njihovu sintezu. Sintetizirati Sorel cement.

Sadržaj predmeta:

Svojstva tvari u čvrstom stanju. Struktura metala i legura. Teorije metalne veze. Teorija poluvodiča i izolatora. Supravodljivost. Električna svojstva tvari (termoelektrični efekti, piezo-, piro- i feroelektricitet). Magnetska svojstva tvari (paramagnetizam, fero-, feri- i antiferomagnetizam, struktura i svojstva magnetskih materijala). Optička svojstva (luminescencija, laseri). Kristalne nesavršenosti i nestehiometrija. Difuzija. Ionska vodljivost, čvrsti elektroliti. Fazni prijelazi. Osnovni preparativni postupci u kemiji čvrstog stanja; monokristali, filmovi, amorfni materijali. Intersticijske faze i refraktorije. Amorfni materijali (staklo, staklokeramika, metalna stakla). Cement.

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- 1. 1. R. West, Solid State Chemistry and its Applications, Wiley, New York, 1998.
- 2. 2. D. Grdenić, Molekule i kristali, Školska knjiga, Zagreb, 2005.

Kemijska kinetika (43991)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Vladislav Tomišić
- Izvođači:
 - dr. sc. Katarina Leko (S)
 - prof. dr. sc. Vladislav Tomišić (P)

Opis predmeta

Radioaktivnost: zakon radioaktivnog raspada, radioaktivni nizovi, određivanje starosti. Definicije kinetičkih pojmova: brzina trošenja i nastajanja, množina kemijskih pretvorbi. Zakoni brzina: diferencijalni i integrirani oblici. Određivanje reda i koeficijenata brzine reakcije iz eksperimentalnih podataka. Složeniji mehanizmi i izvedeni zakoni brzina. Temperaturna ovisnost brzine reakcije. Eksperimentalne tehnike praćenja brzina reakcija: zaustavljeni protok, relaksacijske metode, fotoliza bljeskom, laserske metode. Kinetička teorija plinova. Teorija sudara: parametar sudara, sudarni presjek, sterički faktor. Teorija prijelaznog stanja: glavne pretpostavke, reakcijska koordinata, plohe potencijalne energije, particijske funkcije i statističko termodinamička tumačenja. Kinetički izotopni efekti. Unimolekulske i trimolekulske reakcije. Reakcije u otopinama: utjecaj otapala na brzinu reakcije, solni efekt. Fotokemijske reakcije. Reakcijska dinamika. Kataliza i enzimске reakcije.

ISHODI: 1. Navesti i opisati vrste radioaktivnog raspada. Definirati zakon i konstantu radioaktivnog raspada te vrijeme poluraspada. Navesti radioaktivne nizove i objasniti određivanje starosti pomoću mjerenja aktivnosti izotopa ^{14}C . 2. Odrediti zakon brzine reakcije primjenom raznih eksperimentalnih pristupa i tehnika. 3. Izvesti zakon brzine na temelju raznih pretpostavljenih mehanizama. 4. Detaljno opisati kinetičku teoriju plinova i objasniti njezine rezultate. 5. Izvesti izraz za konstantu brzine reakcije i njezinu temperaturnu ovisnost na temelju teorije sudara. 6. Izvesti izraz za konstantu brzine reakcije i njezinu temperaturnu ovisnost na temelju teorije prijelaznog stanja. Odrediti i interpretirati aktivacijske parametre. Procijeniti kinetičke solne i izotopne efekte. 7. Kritički usporediti rezultate teorije sudara i teorije prijelaznog stanja. 8. Navesti i opisati zakone difuzije i izvesti Stokes-Einsteinovu jednadžbu za difuzijski koeficijent. 9. Razlikovati difuzijom i aktivacijom kontrolirane reakcije u otopini. Izvesti izraz za konstantu brzine difuzijom kontrolirane reakcije. 10. Kvalitativno i kvantitativno opisati homogenu i heterogenu katalizu te autokatalizu.

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- 1. 1. T. Cvitaš, Fizikalna kemija, rukopis u pripremi, kopije dostupne u CKB. 2. S. R. Logan, Fundamentals of Chemical Kinetics, Longman, London 1996. 3. P. W. Atkins, J. de Paula: Atkins' Physical Chemistry, 7. izd., Oxford University Press, Oxford 2002. 4. W. C. Gardiner, Rates and mechanisms of chemical reactions, Benjamin, New York 1969.
- 2. S. R. Logan: Fundamentals of Chemical Kinetics, Longman, London 1996.
- 3. P. W. Atkins, J. dePaula: Atkins' Physical chemistry, 7. izd., Oxford University Press, Oxford 2002.

- **Preporučena literatura:**

- 4. W. C. Gardiner: Rates and mechanisms of chemical reactions, Benjamin, New York 1969.
- 5. S. W. Benson: Thermochemical kinetics, Wiley, New York 1976.

Kemijska termodinamika (227531)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: obavezni
- Semestar: 1

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Gordan Horvat
 - prof. dr. sc. Josip Požar
- Izvođači:
 - dr. sc. Andrea Usenik (S)
 - prof. dr. sc. Gordan Horvat (P, S)
 - prof. dr. sc. Josip Požar (P)

Opis predmeta

Odnos fenomenološke termodinamike i mnoštva čestica (makroskopska i mikroskopska slika). Vjerojatnost i statistika. Fermi-Diracova i Bose-Einsteinova statistika. Razrijeđeni sustavi i Maxwell-Boltzmannova statistika. Najvjerojatnija raspodjela po energijama. Odnos parti-cijskih funkcija za mnoštvo molekula i molekularne parti-cijske funkcije. Lokalizirani i nelo-kalizirani sustavi. Doprinosi pojedinim gibanja parti-cijskim funkcijama. Izvodi makroskop-skih svojstava (termodinamičkih veličina) na temelju parti-cijskih funkcija: U , S , CV , H , p , G , A , kemijski potencijal. Primjena na različite sustave: Einsteinov model kristala, idealni plin, plinske reakcije. Konstanta ravnoteže i molekularne parti-cijske funkcije. Eksperimen-talna termodinamika: prijenos topline, osnovne metode termometrije, reakcijska adijabatska i izotermna (mikro)kalorimetrija, disolucijska kalorimetrija, termodinamičke veličine vezane uz solvataciju, termodinamičke funkcije prijenosa, standardne i empirijske (stehiometrijske) konstante ravnoteže kemijskih reakcija, eksperimentalno određivanje konstanti ravnoteže i drugih termodinamičkih reakcijskih parametara.

Literatura:

1. E. Dickerson: Molecular Thermodynamics, Benjamin, New York 1969.
2. K. S. Pitzer: Thermodynamics, 3. izd., McGraw Hill, New York 1995.
3. N. M. Laurendeau: Statistical Thermodynamics, Cambridge University Press, Cambridge 2005.
4. T. Cvitaš: Fizikalna kemija, rkp. u pripremi i dijelom dostupan u SKK i na mrežnoj adresi <ftp://ftp.chem.pmf.hr/download/cvitas/FizKem>. (poglavlja 15 i 19) DODATNA LITERATURA ZA KOLEGIJ:
5. Vl. Simeon: Termodinamika, Školska knjiga, Zagreb, 1980. i novije izdanje: Vl. Simeon, Kemijska termodinamika, rkp. u pripremi i dijelom dostupan u SKK.

6. D. A. McQuarie, J. D. Simon: Molecular Thermodynamics, University Science Books, Sausalito, CA, 1999.
7. R. H. Fowler, E. A. Guggenheim: Statistical Thermodynamics, 2. izd., The University Press, Cambridge 1956.

Kemijski koncepti u molekulskoj gastronomiji (240409)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - izv. prof. dr. sc. Jana Pisk
- Izvođači:
 - izv. prof. dr. sc. Jana Pisk (P, S)

Opis predmeta

Cilj predloženog kolegija je primijeniti znanstvene spoznaje, inovativne metode i tehnologije u drugačijem okruženju i kontekstu od uobičajenog čime predloženi kolegij predstavlja svojevrsni iskorak u modernom obrazovanju. Kemijski koncepti opće i anorganske kemije poput molekuskog prepoznavanja, inkluzijskih kompleksa, primjene razlikovno- pretražne kalorimetrije i termogravimetrijske analize, homogenih i heterogenih katalitičkih reakcija bit će primijenjeni u molekulskoj gastronomiji.

SADRŽAJ: Osnovni kemijski koncepti i njihova primjena u molekulskoj gastronomiji: npr. mjerne jedinice i stehiometrija, logaritamska skala i pH, međumolekulske i unutarmolekulske sile/interakcije, vrste kemijskih i fizikalnih promjena - neutralizacija, hidroliza, oksidacija, redukcija, denaturacija i koagulacija proteina, Maillardova reakcija.

Svojstva masti, ugljikohidrata i bjelanjčevina u molekulskoj gastronomiji.

Kemija mirisa i okusa. Boje. Molekulsko prepoznavanje i mehanizam molekuskog prepoznavanja. Inkluzijski kompleksi i primjena u molekulskoj gastronomiji.

Elastičnost i naprezanje. Primjena principa elastičnosti u molekulskoj gastronomiji. Utjecaj glutena i natrijevog klorida na elastičnost.

Viskoznost i polimeri. Viskoelastičnost. Standardne metode redukcije, dodatak škroba, masti i ksantina u molekulskoj gastronomiji.

Toplina i temperatura. Termodinamički procesi te primjena termogravimetrijske analize i razlikovne pretražne kalorimetrije u molekulskoj gastronomiji.

Priprava sferifikata i primjena kiselinsko-baznih koncepta i indikatora u molekulskoj gastronomiji.

Koloidni sustavi, emulzije i pjene. Difuzija i Laplaceov tlak u molekulskoj gastronomiji.

Fazne promjene i fazni dijagrami u molekulskoj gastronomiji.

Kristaliničnost i nukleacija i njihova primjena u molekulskoj gastronomiji.

Kataliza. Brzina kemijske reakcije. Inhibicija. Utjecaj temperature i vremena u molekulskoj gastronomiji.

Literatura

• Obavezna literatura:

- M. Brenner, P. Sörensen, D. Weitz (2020): Science and Cooking: Chemistry Meets Food, From Homemade to Haute Cuisine
- H. This (2006): Molecular Gastronomy: Exploring the Science of Flavor
- R. Burke, A. Kelly, C. Lavelle, H. This vo Kientza (2021): Handbook of Molecular Gastronomy: Scientific Foundations, Educational Practices, and Culinary Applications

• Preporučena literatura:

- P. Walstra (2002): Physical Chemistry of Foods
- A. D. Buckingham, A.C Legon, S. M. Roberts (1993): Principles of Molecular Recognition
- G. Kaletunc (2009): Calorimetry in Food processing, Analysis and Design of Food Systems

Ishodi učenja

1. Povezati svojstva ugljikohidrata, masti i bjelančevina stečena tijekom prethodnog obrazovanja s načelima molekulske gastronomije.
2. Predvidjeti usklađenost tvari prema principima molekulske gastronomije.
3. Kombinirati koncept molekuskog prepoznavanja inkluzijskih kompleksa s principima molekulske gastronomije.
4. Ilustrirati principe elastičnosti i naprezanja na primjerima tvari poznatim u molekulskoj gastronomiji.
5. Korelirati viskoznost i svojstva polimera koje se rabe u molekulskoj gastronomiji.
6. Razlučiti termodinamičke karakteristike gastronomskih procesa.
7. Skicirati fazne dijagrame tvari iz molekulske gastronomije.
8. Usporediti rezultate dobivene termogravimetrijskom analizom i razlikovno-pretražnom kalorimetrijom na primjerima iz molekulske gastronomije.
9. Primijeniti kiselinsko-bazne koncepte za dobivanje željenih produkata sferifikacije.
10. Dizajnirati katalitičku reakciju primjenjivu u molekulskoj gastronomiji.

Kemijski koncepti u molekulskoj gastronomiji (kolegij izvođen na engleskom jeziku) (258231)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji: NEMA PODATAKA
- Izvođači:

– izv. prof. dr. sc. Jana Pisk (P, S)

Opis predmeta

Cilj predloženog kolegija je primijeniti znanstvene spoznaje, inovativne metode i tehnologije u drugačijem okruženju i kontekstu od uobičajenog čime predloženi kolegij predstavlja svojevrsni iskorak u modernom obrazovanju. Kemijski koncepti opće i anorganske kemije poput molekuskog prepoznavanja, inkluzijskih kompleksa, primjene razlikovno- pretražne kalorimetrije i termogravimetrijske analize, homogenih i heterogenih katalitičkih reakcija bit će primijenjeni u molekulskoj gastronomiji.

SADRŽAJ: Osnovni kemijski koncepti i njihova primjena u molekulskoj gastronomiji: npr. mjerne jedinice i stehiometrija, logaritamska skala i pH, međumolekulske i unutarmolekulske sile/interakcije, vrste kemijskih i fizikalnih promjena - neutralizacija, hidroliza, oksidacija, redukcija, denaturacija i koagulacija proteina, Maillardova reakcija.

Svojstva masti, ugljikohidrata i bjelancevina u molekulskoj gastronomiji.

Kemija mirisa i okusa. Boje. Molekulsko prepoznavanje i mehanizam molekuskog prepoznavanja. Inkluzijski kompleksi i primjena u molekulskoj gastronomiji.

Elastičnost i naprezanje. Primjena principa elastičnosti u molekulskoj gastronomiji. Utjecaj glutena i natrijevog klorida na elastičnost.

Viskoznost i polimeri. Viskoelastičnost. Standardne metode redukcije, dodatak škroba, masti i ksantina u molekulskoj gastronomiji.

Toplina i temperatura. Termodinamički procesi te primjena termogravimetrijske analize i razlikovne pretražne kalorimetrije u molekulskoj gastronomiji.

Priprava sferifikata i primjena kiselinsko-baznih koncepta i indikatora u molekulskoj gastronomiji.

Koloidni sustavi, emulzije i pjene. Difuzija i Laplaceov tlak u molekulskoj gastronomiji.

Fazne promjene i fazni dijagrami u molekulskoj gastronomiji.

Kristaliničnost i nukleacija i njihova primjena u molekulskoj gastronomiji.

Kataliza. Brzina kemijske reakcije. Inhibicija. Utjecaj temperature i vremena u molekulskoj gastronomiji.

Ishodi učenja

1. Povezati svojstva ugljikohidrata, masti i bjelancevina stečena tijekom prethodnog obrazovanja s načelima molekulske gastronomije.
2. Predvidjeti usklađenost tvari prema principima molekulske gastronomije.
3. Kombinirati koncept molekuskog prepoznavanja inkluzijskih kompleksa s principima molekulske gastronomije.
4. Ilustrirati principe elastičnosti i naprezanja na primjerima tvari poznatim u molekulskoj gastronomiji.
5. Korelirati viskoznost i svojstva polimera koje se rabe u molekulskoj gastronomiji.
6. Razlučiti termodinamičke karakteristike gastronomskih procesa.
7. Skicirati fazne dijagrame tvari iz molekulske gastronomije.
8. Usporediti rezultate dobivene termogravimetrijskom analizom i razlikovno-pretražnom kalorimetrijom na primjerima iz molekulske gastronomije.
9. Primijeniti kiselinsko-bazne koncepte za dobivanje željenih produkata sferifikacije.
10. Dizajnirati katalitičku reakciju primjenjivu u molekulskoj gastronomiji.

Kemijski senzori (43998)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Snežana Miljanić
- Izvođači:
 - Petra Petrović Popović, mag. chem. (S)
 - prof. dr. sc. Snežana Miljanić (P)

Opis predmeta

NASTAVNI SADRŽAJ:

Vrste senzora, svojstva i osnovni principi. Pretvorba signala: elektrokemijski i optički pretvornici. Prepoznavanje analita: vrste aktivnih tvari i načini njihove imobilizacije. Elektrokemijski senzori: potencimetrijski senzori (ion-selektivne elektrode i biosenzori), amperometrijski senzori, senzori na principu tranzistora s efektom polja. Optički senzori na temelju apsorpcije, fluorescencije, prigušene totalne refleksije, površinske plazmonske rezonancije. Primjena senzora u medicini, industriji i analizi okoliša.

ISHODI UČENJA:

Opisati princip rada kemijskih senzora.

Navesti osnovna svojstva kemijskih senzora.

Objasniti elektrokemijsku i optičku pretvorbu signala u kemijskim sensorima.

Razlikovati kemijske senzore s obzirom na način prepoznavanja analita.

Usporediti elektrokemijske senzore prema mjerenom signalu i vrsti selektivne membrane.

Objasniti mehanizme odziva optičkih senzora.

Razlikovati biosenzore prema aktivnoj komponenti.

Opisati načine imobilizacije aktivnih tvari.

Usporediti elektrokemijske i optičke senzore s obzirom na selektivnost, osjetljivost i vrijeme odziva.

Poznavati primjenu kemijskih senzora u medicini, industriji i analizi okoliša.

Osmisliti kemijski senzor za određivanje odgovarajućeg analita.

Literatura

- Obavezna literatura:

- 1. 1. R.F. Taylor, J.S. Schultz, Handbook of Chemical and Biological Sensors, Institute of Physics Publishing, Bristol, 1996.
- 2. O.S. Wolfbeis, Fiber Optic Chemical Sensors and Biosensors, CRC Press, Boca Raton, Florida, 1991.
- 3. R. Narayanaswamy, O.S. Wolbeis, Optical Sensors for Industrial, Environmental and Clinical Applications, Springer, 2003.

Kemometrika (44045)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Vladislav Tomišić
 - prof. dr. sc. Tomica Hrenar
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Tomica Hrenar (P, S)
 - prof. dr. sc. Vladislav Tomišić (P, S)

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

ISHODI: 1. Prikazati temelje teorije vjerojatnosti. 2. Opisati najčešće univarijatne i multivarijatne raspodjele. Opisati i primijeniti lokacijske i disperzijske statističke testove. Provesti račun propagacije pogreške. 3. Opisati i primijeniti jednosmjernu i višesmjernu analizu varijancije (fiksni učinak, sa i bez interakcija). 4. Postaviti teorijsku osnovicu regresijske analize (metoda najmanjih kvadrata) te primijeniti tu metodu u slučaju jednostavne (pravac), multilinearne i polinomne regresije. 5. Prikazati iterativne metode za pronalaženje regresijskih parametara u slučaju nelinearne regresije te primijeniti tu tehniku. 6. Na temelju statističkih kriterija i testova zaključiti je li pretpostavljeni regresijski model adekvatan za opis podataka. 7. Objasniti i primijeniti optimizacijsku metodu Simplexa. 8. Razlikovati univarijatnu od multivarijatne analize podataka. Provesti multivarijatnu regresijsku analizu. 9. Objasniti temelje analize glavnih komponenata i srodnih tehnika te navesti koji se problemi mogu riješiti njihovom primjenom. 10. Provesti obradu podataka korištenjem gore navedenih kemometričkih metoda i komercijalno dostupnih računalnih programa.

Literatura

- Obavezna literatura:

- 1. 1. 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. 2. 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. 3. N. R. Draper, H. Smith: Applied Regression Analysis, Wiley, New York 1976 (1. izd.), 1981 (2. izd.). 4. B. E. Cooper, Statistics for Experimentalists, Pergamon Press, Oxford 1969.
- 2. 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.
- 3. N. R. Draper, H. Smith: Applied Regression Analysis, Wiley, New York 1976. (1. izd.), 1981. (2. izd.).
- 4. B. E. Cooper, Statistics for Experimentalists, Pergamon Press, Oxford 1969.

• **Preporučena literatura:**

- 5. W. R. Dillon, M. Goldstein: Multivariate Analysis - Methods and Applications, Wiley, New York 1984.
- 6. D. L. Massart, B. G. M. Vandeginste, S. N. Deming, Y. Michotte, L. Kaufman: Chemometrics: A Textbook, Elsevier, Amsterdam 1988.
- 7. S. N. Deming, S. L. Morgan: Experimental Design: A Chemometric Approach, Elsevier, Amsterdam 1987.
- 8. I. Pavlič, Statistička teorija i primjena, 4. izd., Tehnička knjiga, Zagreb 1988.
- 9. W. H. Press, B. P. Flannery S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling: Numerical Recipes, Cambridge University Press, Cambridge 1986. (i kasnija izdanja).

Koloidna i međupovršinska kemija (43981)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Tajana Begović
- Izvođači:
 - Tea Juračić, univ. mag. chem. (S)
 - prof. dr. sc. Tajana Begović (P)

Opis predmeta

Uvod: agregacijska stanja, međupovršine, koloidi. Koloidno stanje: topljivost, nukleacija, kinetika kristalnog rasta i otapanja, karakterizacija koloida. Dinamika: Brownovo gibanje, difuzija, sedimentacija, ultracentrifuga. Adsorpcija: ravnoteža, empirijske izoterme. Električnost površina i koloida: površinske reakcije, električni međupovršinski sloj, ravnoteža, elektrokinetika. Stabilnost koloida: interakcije među česticama, kinetika agregacije. Površinski aktivne tvari: topljivost, miceliranje, emulzije. Primijenjena koloidna kemija.

ISHODI:

- razlikovati koloidne sustave i njihova svojstva od makroskopskih sustava
 - objasniti ravnotežne procese u koloidnim sustavima na kvantitativnoj razini
 - opisati gibanje koloidnih čestica (sedimentacija, difuzija)
 - navesti parametre i kvantitativno opisati koji utječu na koloidnu stabilnost i brzinu agregacije
 - kvalitativno i kvantitativno opisati električni međupovršinski sloj te reakcije površinskog kompleksiranja i adsorpcije
 - navesti osnovne metode za karakterizaciju koloidnih sustava
 - opisati površinski aktivne tvari i njihovu samoorganizaciju
1. T. Begović, T. Klačić, N. Kallay, Koloidna i međupovršinska kemija, interna skripta, Kemijski odsjek, PMF.
 2. R. J. Hunter: Introduction to Modern Colloid Science, Oxford University Press, Oxford 2002.
 3. D. Evans and H. Wennerström, The Colloidal Domain, Wiley-VCH, 1999.
 4. J. C. Berg: Introduction to interfaces and colloids, Word Scientific, New Jersey, 2010.
 5. S. Bucak, D. Rende: Colloid and Surface Chemistry, CRC Press, New York, 2014.
 6. J. Luetzenkirchen, Surface Complexation Modeling, Elsevier, 2006.

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- 1. N. Kallay, Koloidna i međupovršinska kemija, interna skripta, Kemijski odsjek, PMF.
- 2. R. J. Hunter: Introduction to Modern Colloid Science, Oxford University Press, Oxford 2002.
- 4. J. C. Berg: Introduction to interfaces and colloids, Word Scientific, New Jersey, 2010.
- 5. S. Bucak, D. Rende: Colloid and Surface Chemistry, CRC Press, New York, 2014.
- 7. R. J. Hunter, Introduction to Modern Colloid Science, Oxford University Press, 2002.

- **Preporučena literatura:**

- 3. D. Evans and H. Wennerström, The Colloidal Domain, Wiley-VCH, 1999.
- 6. J. Luetzenkirchen, Surface Complexation Modeling, Elsevier, 2006.

Kompleksni spojevi prijelaznih metala u katalizi (44020)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - izv. prof. dr. sc. Jana Pisk
- Izvođači:
 - izv. prof. dr. sc. Jana Pisk (P)
 - Josipa Sarjanović, univ. mag. chem. (S)

Opis predmeta

Cilj predmeta je objasniti osnovne principe katalize te povezati navedene koncepte s načelima zelene kemije. Temeljni katalitički procesi primjenjivi za pripravu industrijski važnih spojeva bit će korelirani na osnovi proučavanih katalitičkih parametara.

SADRŽAJ: Definicija katalize; djelovanje katalizatora; homogena i heterogena kataliza; primjena načela zelene kemije u katalitičkim procesima, kompleksi metala kao molekularni katalizatori; katalitički ciklusi; važne reakcije katalizirane molekulskim katalizatorima (hidrogenacija, hidroformilacija, sinteza octene kiseline iz metanola i ugljikova monoksida, polimerizacija alkena i dr.); komercijalne prednosti heterogene katalize; jednofazni i višefazni heterogeni katalizatori; mehanizmi heterogene katalize; važne heterogene katalize (oksidacija sumporova(IV) oksida u sumporov(VI) oksid, hidrogenacija alkena, sinteza amonijaka, polimerizacija alkena, katalitička totalna oksidacija polutanata; izomerizacija ugljikovodika, elektrokemijska kataliza).

U okviru seminara se obrađuju aktualne teme iz tog područja na osnovi izvornih znanstvenih radova ili preglednih radova o kojima izvješćuju sami studenti.

Literatura

- Obavezna literatura:
 - P. Fuderer (1976): Kataliza i katalizatori
 - I. Chorkendorff, J. W. Niemantsverdriet (2003): Concepts of Modern Catalysis and Kinetics
- Preporučena literatura:
 - R. A. Sheldon, I. W. C. E. Arends, U. Hanefeld (2007): Green Chemistry and Catalysis

Ishodi učenja

1. Dizajnirati katalitičku reakciju za dobivanje željenog produkta.
2. Prilagoditi katalitički proces slijedeći načela zelene kemije.
3. Korelirati primjenu molekulskih i heterogenih katalizatora za pojedine katalitičke reakcije.
4. Odabrati metode za dokazivanje nastalih međuprodukata reakcije, tj. praćenje katalitičkog ciklusa.
5. Povezati aktualna istraživanja u području katalize s konceptima prezentiranim u okviru kolegija

Kristalni inženjering (72805)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - izv. prof. dr. sc. Nenad Judaš
- Izvođači:
 - izv. prof. dr. sc. Nenad Judaš (P, S)

Opis predmeta

NASTAVNI SADRŽAJI

1-2. Supramolekulski sintoni i kristalni inženjering 3. Ciljani materijali (koordinacijski polimeri i druge metal-organske kristalne strukture, klatrati, inkluzijski spojevi) 4-5. Metode analize (difrakcija rentgenskog zračenja, termička analiza, IR-spektroskopija, AFM, SEM, TEM, DLS) 6-8. Strategije dizajniranja ("molekulska knjižnica", model simetrijskih interakcija, molekulske paneli, molekulske tektoni, nanokokristali) 9-10. Računalne i sintetske metode (tekućinske i ne-tekućinske sinteze, sinteze uz uporabu zvuka i ultrazvuka, metoda faznih prijelaza iniciranih tekućom fazom) 11-12. Primjena kristalnog inženjeringa (farmaceutski kokristali, elektronički materijali, sinteza materijala ciljanih svojstava, kontrola postojanosti ciljanih spojeva, skladištenje plinova, separacija spojeva, peptidni materijali, optički materijali) 13. Kristalni inženjering na površinama 14-15. Povijesni pregled do 2000. godine (Kitaigorodski, Schmidt, Etter, Desiraju, Zaworotko, Atwood, Gokel, Braga, Wuest, Aakeröy, Jones, McGillivray). Metodologija: Nastavni sadržaji obrađuju se različitim oblicima rada (izlaganje, razgovor, seminarska izlaganja studenata, domaće zadaće, predavač-gost). Kolegij ima svoje web-sučelje na sveučilišnom sustavu za udaljeno učenje Merlin na kojem su studentima dostupni nastavni materijali i na kojem mogu obavljati zadaće i interaktivno provjeravati svoje znanje.

ISHODI UČENJA

- OL.1 Navesti i objasniti međumolekulske interakcije bitne za kristalno inženjerstvo.
- OL.2 Navesti i objasniti strategije dizajniranja u kristalnom inženjerstvu.
- OL.3 Navesti i opisati uporabu računalnih i sintetskih metoda u kristalnom inženjerstvu.
- OL.4 Objasniti pojam kokristala i opisati primjenu kokristala.
- OL.5 Predložiti rješenje specifično definiranog (zadanog, odabranog) problema u kristalnom inženjerstvu.
- OL.6 Opisati strategiju kristalnog inženjerstva na površinama.
- OL.7 Analizirati i kritički ocijeniti znanstveni članak iz područja kristalnog inženjerstva.
- OL.8 Napisati kratki sastavak na zadanu temu iz područja kristalnog inženjerstva i pri tome rabiti ispravnu terminologiju.
- OL.9 Održati kratko izlaganje na zadanu temu iz područja kristalnog inženjerstva.

OL10 Dati kratak povijesni pregled razvoja područja kristalnog inženjeringa do 2005. godine.

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- 1. Kako nema udžbenika (ni knjiga) na hrvatskom jeziku koji bi se bavili ovom tematikom uz kolegij će biti naveden određen broj izvornih i preglednih znanstvenih radova koji su relevantni za područje kristalnog inženjeringa. Radovi će studentima biti dostupni na web-stranicama kolegija.

Kristalokemija (43976)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Marijana Đaković
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Marijana Đaković (P, S)

Opis predmeta

ISHODI UČENJA:

1. Definirati operacije simetrije, Bravaisove rešetke, kristalne sustave, točkine i prostorne grupe
2. Navesti osnovne tipove kristalnih struktura metala i legura.
3. Opisati fazne dijagrame. Računati udjele i sastave komponenata iz binarnog faznog dijagrama.
4. Navesti karakteristike ionske veze i opisati osnovne strukture ionskih spojeva.
5. Objasniti intermolekulske interakcije kod kovalentnih struktura.
6. Opisati osnovne metode određivanja kristalnih struktura.
7. Objasniti ovisnost strukture i svojstava.

NASTAVNI SADRŽAJ:

1. Svojstva kristala (nukleacija, rast, habitus, boja, tvrdoća).
 2. Millerov indeks; elementi simetrije: prave i neprave osi simetrije; točkine grupe; stereografska projekcija.
 3. Elementi simetrije: vijčane osi, klizne ravnine; Bravaisove rešetke; prostorne grupe (simboli prostornih grupa); kvazikristali.
 4. Prostorne grupe (detaljno); guste slagaline.
 5. Osnove rentgenske difrakcije (Braggov zakon, recipročna rešetka, simetrija difrakcijske slike, uvjeti pogašenja refleksa).
 6. Baze kristalnih struktura.
 7. Struktura metala i legura (čvrste otopine, intermetalni spojevi, Lavesove faze, intersticijske legure, Hume-Rotheryjeve faze, valentni intermetalni spojevi); fazni dijagrami.
 8. Ionska veza (ionski radijus, energija rešetke, Paulingova pravila).
 9. Važniji strukturni tipovi ionskih kristala.
 10. Silikati. Beskonačne kovalentne strukture.
 11. Molekulski kristali (međuatomske interakcije, energija rešetke).
 12. Možemo li pretpostaviti strukturu molekulskog kristala?
 13. Supramolekulske strukture.
 14. Strukture proteina.
- Tijekom svih predavanja o strukturama: odnos strukture i svojstava.

Literatura

- Obavezna literatura:

- 1. 1. A. R. West: Solid State Chemistry and its Applications, Wiley, New York, 1998.
- 2. D. Grdenić, Molekule i kristali, Školska knjiga, Zagreb, 2005.

• **Preporučena literatura:**

- 2. C. Giacovazzo, H.L. Monaco, D. Viterbo et al.: Fundamentals of Crystallography, 2. izd., IUCr, Oxford Univ. Press, Oxford 2002.

Kvantna kemija (227530)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - nasl. prof. dr. sc. Nađa Došlić
 - prof. dr. sc. Tomica Hrenar
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Tomica Hrenar (P)
 - nasl. prof. dr. sc. Nađa Došlić (P)
 - dr. sc. Marin Sapunar (S)

Opis predmeta

NEMA PODATAKA

Magnetokemija (72802)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Mirta Rubčić
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Mirta Rubčić (P)
 - doc. dr. sc. Edi Topić (P, S)

Opis predmeta

NASTAVNI SADRŽAJ: Magnetokemijska mjerenja u anorganskoj, organskoj, analitičkoj kemiji i biokemiji. Tipovi magnetizma u koordinacijskoj kemiji: paramagnetizam, feromagnetizam, metamagnetizam i antiferomagnetizam. Magnetska svojstva kompleksnih spojeva elemenata d- i f-bloka: feromagnetizam i antiferomagnetizam. Utjecaj liganada na magnetska svojstva: dizajn polinuklearnih kompleksa i njihova magnetska svojstva. Utjecaj otapala na magnetska svojstva: molekulski magneti. Spin crossover kod kompleksa Fe(II); Izabrani primjeri: klusteri, polioksometalati, biomagnetokemija Co(II); Eksperimentalne tehnike.

U okviru seminara studenti obrađuju znanstveni rad i prezentiraju ga.

ISHODI UČENJA:

1. Opisati najznačajnija otkrića važna za razvoj magnetokemije od antike do 20. stoljeća.
2. Objasniti osnovne pojmove vezane uz magnetizam.
3. Opisati i objasniti najvažnije utjecaje na magnetska svojstva koordinacijskih spojeva.
4. Objasniti osnovne značajke molekulskih magneta- nanomagneta.

Literatura

- Obavezna literatura:
 - 1. R. L. Carlin, Magnetochemistry, Springer-Verlag, Berlin, 1986.
 - 2. L. Que, Jr., Physical Methods in Bioinorganic Chemistry (Spectroscopy and Magnetism), University Science Books, Sausalito, California, 2000.
 - 3. O. Kahn, Molecular Magnetism, Wiley, New York, 1993.

Mehanizmi katalize u biološkim sustavima (72841)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Ita Gruić Sovulj
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Ita Gruić Sovulj (P, S)

Opis predmeta

Kemijska kataliza (teorija prijelaznog stanja, principi kemijske katalize, principi enzimске katalize, kinetički izotopni efekt, uloga koenzima). Izabrani primjeri enzimске katalize (proteaze, metaloenzimi). Temeljne jednadžbe enzimске kinetike (kinetika stacionarnog 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). Utjecaj pH na enzimsku katalizu. Metode za mjerenje kinetike i ravnoteže (fluorescencijska spektroskopija; termodinamske i kinetičke metode za određivanje K_d). Detekcija međuprodukta u enzimski kataliziranoj reakciji. Ireverzibilna inhibicija. Alosteričke interakcije (pozitivna i negativna kooperativnost, Hill-ova jednadžba). Komplementarnost enzima i supstrata te korištenje energije vezanja u katalizi (tirozil-tRNA-sintetaza kao primjer, katalitička antitijela). Izabrani primjeri enzimski kataliziranih reakcija (restriksijske endonukleaze, DNA-polimeraze). katalitička RNA i ribonukleoproteinski kompleksi (RNaza P)

ISHODI UČENJA: Očekuje se da će nakon uspješno položenog ispita studenti moći

1. Objasniti i pokazati sposobnost razlučivanja osnovnih principa enzimске katalize (kiselinsko-bazna kataliza, kovalentna kataliza, elektrostatska kataliza, upotreba vezne energije u katalizi).
2. Objasniti ulogu kofaktora u biokatalizi, modele monosupstratne i višesupstratne enzimске reakcije, ulogu i vrste inhibicije te utjecaj pH na enzimsku reakciju.
3. Objasniti Michaelis-Menten i Briggs-Haldane modele enzimске katalize, pokazati razumijevanje kinetičkih parametara dobivenih kinetikom ustaljenog stanja (prednosti i limitacije kinetike ustaljenog stanja) te prikazati osnovne matematičke jednadžbe koje opisuju navedene modele.
4. Objasniti metode kinetike predustaljenog stanja (kinetika jednog kruga i burst kinetika), pokazati razumijevanje kinetičkih parametara dobivenih tim metodama te prikazati osnovne matematičke jednadžbe koje se koriste za utočnjavanje eksperimentalnih podataka.
5. Objasniti metode za određivanje stabilnosti interakcije protein:ligand, pokazati razumijevanje parametara dobivenih tim metodama te prikazati osnovne matematičke jednadžbe koje opisuju najčešće i najjednostavnije modele interakcije.

6. Navesti i objasniti metode fluorescencijske spektroskopije koje se koriste za praćenje procesa u biološkim sustavima.
7. Vizualizirati strukture proteina, samih ili u kompleksu s raznim ligandima, koristeći koordinate atoma pohranjene u proteinskim bazama podataka.
8. Usporediti i zaključiti o sličnostima i razlikama između proteinskih i ribonukleoproteinskih enzima.
9. Pokazati razumijevanje temeljnih fenomena katalize u biološkim sustavima koji su vezani uz trodimenzionalnu strukturu proteina i modularnu i/ili oligomernu građu proteina.
10. Demonstrirati razumijevanje i sposobnost prosudbe o mogućnosti upotrebe raznih komplementarnih metoda s ciljem rasvjetljavanja mehanizama enzimske reakcije kako u izvornim znanstvenim radovima tako i u samostalnom mini-projektu.

Literatura

• Obavezna literatura:

- 1. 1. A. Fersht, Structure and Mechanism in Protein Science: A Guide to Enzyme Catalysis and Protein Folding, W. E. Freeman and Company, New York, 1999.
- 2. Pregledni znanstveni radovi po izboru nastavnika
- 3. Izvorni znanstveni radovi po izboru nastavnika

• Preporučena literatura:

- 2. Perry A. Frey and Adrian D. Hegeman, Enzymatic Reaction Mechanisms, Oxford University Press, 2007
- I. H. Segel, Enzyme Kinetics : Behavior and Analysis of Rapid Equilibrium and Steady-State Enzyme Systems, Wiley Classics Library Edition, 1993

Metali i liganatna reaktivnost (240413)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 45(P)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:

– prof. dr. sc. Dominik Cinčić

- Izvođači:

– prof. dr. sc. Dominik Cinčić (P)

Opis predmeta

SADRŽAJ PREDMETA:

- 1) Ciklički ligandi i templatni učinak. (1., 2. tjedan)
- 2) Vijčane molekule, katenani i rotaksani. (3., 4. tjedan)
- 3) Metaloorganske mreže: sinteza i svojstva. (5., 6. tjedan)
- 4) Metaloorganska supramolekulska kemija u čvrstom stanju. (7., 8. tjedan)
- 5) Metaloorganski materijali ugodivih svojstava i kristalno inženjerstvo višekomponentnih metaloorganskih materijala (soli, kokristala i kokristala soli). (9., 10. tjedan)
- 6) Liganatna reaktivnost u čvrstom stanju, sinteza metaloorganskih materijala u čvrstom stanju. (11., 12. tjedan)
- 7) Mehanokemijske reakcije i reakcije starenja: sinteza diskretnih koordinacijskih spojeva i koordinacijskih polimera (2D i 3D). (13.-15. tjedan)

ISHODI UČENJA:

- 1) Objasniti templatni učinak pri sintezi cikličkih liganada, katenana i rotaksana.
- 2) Povezati znanja stečena o kemiji koordinacijskih spojeva s principima supramolekulske kemije.
- 3) Prepoznati topologiju supramolekulskog povezivanja metaloorganskih spojeva.
- 4) Objasniti pojmove: metaloorganski materijal, koordinacijski polimer i metaloorganske mreže.
- 5) Objasniti pojmove soli, kokristali i kokristali soli metaloorganskih spojeva.
- 6) Navesti i opisati metode mehanokemijske sinteze metaloorganskih spojeva i korelirati s reakcijama starenja.

Ishodi učenja

1. Objasniti templatni učinak pri sintezi cikličkih liganada, katenana i rotaksana.
2. Povezati znanja stečena o kemiji koordinacijskih spojeva s principima supramolekulske kemije.
3. Prepoznati topologiju supramolekulskog povezivanja metaloorganskih spojeva.
4. Objasniti pojmove: metaloorganski materijal, koordinacijski polimer i metaloorganske mreže.
5. Objasniti pojmove soli, kokristali i kokristali soli metaloorganskih spojeva.
6. Navesti i opisati metode mehanokemijske sinteze metaloorganskih spojeva i korelirati s reakcijama starenja.

Metode sinteze u organskoj kemiji (44056)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Vesna Petrović Peroković
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Vesna Petrović Peroković (P, S)

Opis predmeta

NASTAVNI SADRŽAJI:

Oživljavanjem znanja organske i fizikalno-organske kemije iz ranijih kurseva omogućuje se planiranje sinteza organskih molekula različite kompleksnosti. Planiranje se zasniva na retrosintetskoj analizi, ili pristupu diskonekcije, kako ih je uveo Warren (1,2). Mehanistički aspekti najvažnijih sintetskih transformacija razmatraju se u odnosu na koncept stabilnih sintona, posebno u reakcijama nastajanja veze ugljik-ugljik. U tom kontekstu se upoznaju principi alternacije naboja, te definiraju očigledni i neočigledni (nelogični) sintetski ekvivalenti ili reagensi. Ukazuje se na značenje modernih, katalitičkih sintetskih metoda kao izvora funkcionalnih skupina i njihove interkonverzije. Naglašavaju se karakteristike sintetskih uvjeta i protokola na laboratorijskoj i industrijskoj skali.

ISHODI UČENJA:

Definirati i objasniti osnovne pojmove vezane uz retrosintetsku analizu (ciljna molekula, diskonekcija, sinton i sintetski ekvivalent).

Navesti, objasniti i primijeniti retrosintetske alate (diskonekcija, interkonverzija funkcijske skupine, adicija funkcijske skupine i druge) u retrosintetskom pristupu ciljnim molekulama.

Navesti sintetske ekvivalente na temelju strukture sintona.

Klasificirati i retrosintetski analizirati ciljne molekule s obzirom na položaj funkcijskih skupina u molekuli (1,2-, 1,3-, 1,4-, 1,5- i 1,6-difunkcionalizirani spojevi).

Planirati i napisati sintezu organskih molekula na temelju retrosintetske analize.

Proširiti znanja organske kemije i primijeniti ih u rješavanju zadataka.

Literatura

- Obavezna literatura:
 - 1. S. Warren, Designing Organic Synthesis, A Programmed Introduction to the Synthon Approach, 5. izdanje, J. Wiley & Sons, 1989.

2. S. Warren, P. Wyatt, Organic Synthesis, The Disconnection Approach, 2. izdanje, J. Wiley & Sons, 2008.
3. S. Warren, Workbook for Organic Synthesis, 4. izdanje, J. Wiley & Sons, 1989.

• **Preporučena literatura:**

- 2. F. A. Carey, R. J. Sundberg: Advanced Organic Chemistry, Part. B: Reactions and Synthesis, Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2001, posebno poglavljja 8-10 i 13.
- 3. J. March: Advanced Organic Chemistry, Reactions, Mechanisms and Structure, 4. izdanje, Wiley, New York, 1992, posebno poglavljja 5, 6, 8 i 9.
- 4. F. Serratosa, J. Xicart: Organic Chemistry in Action, The Design of Organic Synthesis, Elsevier, 1996.

Modeliranje biomakromolekula (198316)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - izv. prof. dr. sc. Aleksandra Maršavelski
- Izvođači:
 - izv. prof. dr. sc. Aleksandra Maršavelski (P, S)

Opis predmeta

Kolegij upoznaje studente s različitim metodama i tehnikama simulacija, analize i vizualizacije koje se koriste u suvremenom modeliranju bioloških interakcija. Uz modeliranje biomakromolekula i njihovih kompleksa, obradit će se i metode koje se koriste u modeliranju enzimski kataliziranih kemijskih reakcija. Studenti će dobiti detaljan uvid u najnovija kombinirana računalna i eksperimentalna istraživanja kako bi razumjeli računalni doprinos u dizajnu, interpretaciji te rješavanju konkretnih problema u biokemiji. Studenti će steći praktične vještine i znanja iz oblasti računalne biokemije.

Studenti će upoznati različite metode i tehnike simulacije, analize i vizualizacije simuliranih kompleksa biomakromolekula te enzimski kataliziranih kemijskih reakcija. Ovladat će praktičnim znanjem u korištenju dostupnih programa za razumijevanje ponašanja biomakromolekula (proteina, lipida, ugljikohidrata te DNA i RNA). Stjecanja praktičnog znanja u oblasti računalne biokemije pružit će studentima novi aspekt u razumijevanju biokemijskih i bioloških sustava čija svojstva obrađuju i drugi kolegiji u grani biokemije diplomskog studija kemije (Viši praktikum biokemije, Biofizika stanice, Mehanizmi katalize u biološkim sustavima, Genomika i bioinformatika, Enzimska kataliza u organskoj sintezi, Stanična biokemija).

Ishodi učenja:

- objasniti i primijeniti suvremene teorijske metode za opis strukture i svojstava tvari
- povezati strukture tvari i kemijske reaktivnosti
- opisati i objasniti mehanizme kemijskih reakcija, strukturne, energijske i kinetičke promjene tijekom specifičnih kemijskih reakcija, te bioloških i fizikalnih procesa
- koristiti kemijsku terminologiju
- odabrati i kreativno koristiti postojeće modele za interpretaciju eksperimentalnih rezultata
- samostalno koristiti znanstvenu i stručnu literaturu te ostale relevantne izvore informacija
- samostalno pratiti razvoj novih spoznaja u polju kemije te formirati stručno mišljenje o njihovom dosegu i mogućim primjenama
- primijeniti stečeno znanje i vještine u svom daljnjem stručnom ili akademskom usavršavanju
- odgovorno pristupiti u provođenju i izvršavanju zadataka

1. Opisati strukturne baze podataka koje se koriste u modeliranju biomakromolekula i njihovih kompleksa s malim spojevima. Dizajnirati mutirane inačice proteina, izgraditi komplekse proteina i malih spojeva (inhibitora, supstrata, oligosaharida i sl.), zatim komplekse proteina i nukleinskih kiselina, transmembranskih proteina u modelu membrane.
2. Opisati pristupe u de novo modeliranju proteina (najčešće korišteni pristupi/programi/serveri)
3. Objasniti modeliranje protein-protein interakcija
4. Primijeniti polja sila koja se koriste u modeliranju biomakromolekula i njihovih kompleksa; Primijeniti parametrizaciju i optimizaciju izgrađenih kompleksa te modeliranje posttranslacijskih dorada.
5. Primijeniti produktivne simulacije molekulske dinamike.
6. Primijeniti modeliranje enzimski kataliziranih reakcija: QM, QM/MM, EVB. Izračunati energije aktivacije
7. Primijeniti analizu trajektorija dobivenih simulacijama biomakromolekulskih kompleksa i enzimski kataliziranih reakcija
8. Koristiti programe za vizualizaciju te prikazati različite načine vizualiziranja proteina

Teme predavanja:

Koncepti u molekulskom modeliranju. Strukturne baze podataka. Izgradnja biomakromolekulskih kompleksa. Računalne metode utemeljene na polju sila. Molekulska mehanika. Molekulska dinamika. Polja sila koja se koriste u modeliranju različitih bioloških makromolekula. Parametrizacija izgrađenih sustava. Osnovni pojmovi iz statističke fizike i termodinamike. Osnovni algoritmi koji se koriste za optimizaciju izgrađenih kompleksa. Tipovi ansambla. Rubni uvjeti. Modeliranje membrana, lipida te membranskih proteina i peptida. Modeliranje glikoproteina i ugljikohidrata. Modeliranje nukleinskih kiselina DNA/RNA u kompleksima s malim spojevima i/ili proteinima. Produktivne molekulsko-dinamičke (MD) simulacije. MD simulacije krupnog zrna (engl. coarse grained MD) za praćenje konformacijskih promjena proteina. Izračun Gibbsove energije vezanja liganda. Modeliranje enzimski kataliziranih reakcija: kvantno-mehanički, kvantno-mehaničkih/molekulsko-mehanički pristup te simulacije EVB (engl. empirical valence bond). Izračun energije aktivacije. Analiza trajektorija dobivenih u simulacijama. Programi koji se koriste za vizualizaciju te različiti načini vizualiziranja proteina. Programi za simuliranje enzimski kataliziranih reakcija. Programi za obradu podataka.

Na seminarima će se obrađivati problemski zadaci vezani uz modeliranje biomakromolekulskih kompleksa.

Sadržaj seminara podrazumijeva sljedeće praktične aktivnosti u računalnoj učionici:

1. Izgradnja kompleksa, pri čemu će se moći birati hoće li se modelirati protein u kompleksu s malim ligandom, protein u kompleksu s fragmentom nukleinske kiseline, protein u kompleksu s oligosaharidom, fragment nukleinske kiseline s interkalatorom, transmembranski protein u modelu membrane. Pri tome protein može biti i postranslacijski doraden (npr. glikoziliran) te može sadržavati nestandardnu aminokiselinu ili kofaktor. Mogu se koristiti inačice proteina sa zamijenjenim aminokiselinama.
2. Parametrizacija i izgradnja topologije, postupak dobivanja parametara za prethodno izgrađen kompleks što je neophodno za izvođenje računalnih simulacija. Korištenje određenog tipa polja sila u ovisnosti o prethodno izgrađenom kompleksu. Solvatacija kompleksa.
3. Optimizacija geometrije, relaksacija i zagrijavanje sustava na radnu temperaturu te izvođenje klasičnih molekulsko-dinamičkih simulacija. Korištenje periodičnih rubnih uvjeta (PBC), tretiranje elektrostatskih interakcija, algoritam SHAKE. Kanonski (NVT) i izotermno-izobarni ansambl (NPT).

4. Analiza molekulsko-dinamičkih trajektorija. Analiza specifičnih interakcija ostvarenih u okviru modeliranog kompleksa. Analiza prosječnih udaljenosti i kuteva. Analiza vodikovih veza. Različiti načini vizualiziranja.
5. Izračun Gibbsove energije vezanja. Za procjenu Gibbsove energije vezanja koristit će se MM-PBSA (engl. Molecular Mechanics Poisson-Boltzmann Surface Area) metoda koja je implementirana u programski paket AMBER.
6. Na jednom odabranom primjeru enzima proći će se kroz simulacije enzimski katalizirane reakcije primjenom EVB metode u programskom paketu Q. Priprema podrazumijeva parametризaciju i izgradnju topologije, definiranje reaktivne regije, optimizacija geometrije, relaksacija i zagrijavanje sustava na radnu temperaturu te izvođenje kratkih klasičnih molekulsko-dinamičkih simulacija za dobivanje početnih struktura za izvođenje FEP simulacija (engl. free energy perturbation). Izračun energije aktivacije i promjene Gibbsove reakcijske energije. Prikaz strukture prijelaznog stanja (prijelazna struktura). Primjena dekompozicijske metode LRA (engl. linear response approximation) za procjenu doprinosa aminokiselina aktivnog mjesta katalitičkom efektu.

Literatura:

1. Molecular modelling: Principles and Applications A.R. Leach Prentice Hall 2001
2. Molecular Modeling Basics J.H. Jensen CRC Press, Taylor & Francis 2010
3. Molecular Modeling of Proteins (Methods in Molecular Biology) A. Kukol Springer Nature 2015
4. Computer Modeling of Chemical Reactions in Enzymes and Solutions A. Warshel Wiley 1997

Literatura

• Obavezna literatura:

- A.R. Leach (2001): Molecular modelling: Principles and Applications
- J.H. Jensen (2010): Molecular Modeling Basics
- A. Kukol (2015): Molecular Modeling of Proteins (Methods in Molecular Biology)

• Preporučena literatura:

- A. Warshel (1997): Computer Modeling of Chemical Reactions in Enzymes and Solutions

Molekularna biofizika (198313)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 45(P) + 15(S) + 30(V)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Branimir Bertoša
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Branimir Bertoša (P, S, V)

Opis predmeta

Literatura:

W.C. Johnson, P.S. Ho, Principles of Physical Biochemistry, Prentice Hall, Upper Saddle River, USA, 1998

R.M.J. Cotterill BIOPHYSICS (An Introduction), J. Wiley, West Sussex, 2006

D. Sheehan Physical Biochemistry (Principles and Applications), J. Wiley, West Sussex, 2000

T.A. Waigh Applied Biophysics, J. Wiley, West Sussex, 2007

Literatura

- Obavezna literatura:
 - K.E. van Holde, W.C. Johnson, P.S. Ho (1998): Principles of Physical Biochemistry
- Preporučena literatura:
 - R.M.J. Cotterill (2006): BIOPHYSICS (An Introduction)
 - Physical Biochemistry (Principles and Applications), (2000): D. Sheehan
 - T.A. Waigh (2007): Applied Biophysics

Molekularna genetika (44030)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 45(P) + 45(V)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Ivana Ivančić Baće
- Izvođači:
 - Tomislav Mamić, mag. biol. mol. (V)
 - prof. dr. sc. Ivana Ivančić Baće (P)
 - Mirta Žagar, univ. mag. biol. mol. (V)

Opis predmeta

ISHODI UČENJA:

1. Objasniti karakteristike te prednosti i mane rada s bakterijom *Escherichia coli*.
2. Navesti različite vrste mutacija i njihove karakteristike. Usporediti karakteristike mutacija, te na temelju ponašanja mutanta predvidjeti vrstu mutacije.
3. Objasniti metode stvaranja mutanata te ukazati na prednosti i mane svake metode. Dizajnirati početnice za stvaranje točkastog i delecijuskog mutanta.
4. Navesti i kritički usporediti osnovne tipove mutagena.
5. Objasniti vrste supresorskih mutacija, objasniti njihov značaj u genetičkoj analizi te navesti primjere.
6. Objasniti i usporediti nove metode genetičke manipulacije viših eukariota. Kritički prosuditi prednosti i mane svake metode.
7. Navesti i objasniti mehanizme popravka DNA, povezati ulogu popravka DNA na nastanak mutacija i preživljenje. Navesti primjere popravka DNA kod eukariota i bolesti kod ljudi povezane s nefunkcionalnim popravkom DNA.
8. Objasniti mehanizam i puteve homologne rekombinacije kod prokariota, te usporediti s rekombinacijskim popravkom kod eukariota.
9. Navesti i usporediti pokretne genetičke elemente. Objasniti mehanizme pokretanja.
10. Navesti vrste plazmida i objasniti regulaciju broja kopija i diobu.
11. Objasniti konjugaciju, mehanizam ugradnje i izrezivanja F plazmida u genomsku DNA, te usporediti F' i Hfr sojeve.
12. Objasniti karakteristike bakteriofaga i njihovu primjenu u prijenosu DNA. Usporediti karakteristike litičkih i lizogenih faga. Objasniti i navesti mehanizme zaštite bakterija od napada fagima.
13. Objasniti regulaciju životnog ciklusa bakteriofaga lambda. Navesti glavne regulatorne gene i objasniti njihovu međusobnu interakciju. Navesti primjenu faga lambda u genetičkom inženjerstvu.

14. Objasniti ulogu regulatornih RNA u ekspresiji gena kod prokariota i eukariota, te mehanizam nastanka. Usporediti miRNA, siRNA i piRNA.
15. Objasniti mehanizam regulacije odgovora na povišenu temperaturu, te navesti vrste šaperona i njihovu ulogu u smatanju proteina.

NASTAVNI SADRŽAJI:

1. Fiziologija bakterije *Escherichia coli* i organizacija njenog genoma: tumači se građa genoma bakterije *E. coli*, kako je određen položaj gena u genomu, nomenklatura gena, te kako se na internetu mogu pronaći podaci o sekvenci svakog pojedinačnog gena.
2. Mutacije i mutageneza: vrste mutacija; spontane i inducirane mutacije; mutageni; intra- i intergenska supresija mutacija; izolacija mutanata; in vitro mutageneza. Metode stvaranja mutanata u prokariotima i eukariotima.
3. Genetička analiza u bakterijama: svrstavanje mutanata u alelne skupine, komplementacija; epistaza; određivanje redoslijeda mutacija
4. Popravak DNA: tumače se osnovni tipovi popravka DNA i enzimi uključeni u te procese: fotoreaktivacija; popravak krivo sparenih baza; ekscizijski popravak nukleotida i baza; rekombinacijski popravak; popravak sklon pogreškama; SOS odgovor.
5. Homologna rekombinacija u prokariota i eukariota: molekularna osnova rekombinacije; molekularni modeli rekombinacije; rekombinacija kod eukariota
7. Plazmidi: podjela plazmida; svojstva plazmida; građa plazmida; inkompatibilnost; kontrola broja kopija plazmida.
8. F-plazmid i konjugacija: mehanizam prijenosa DNA; Hfr i F' sojevi; mapiranje pomoću Hfr križanja.
9. Pokretni genetički elementi: transpozoni i retrotranspozoni.
10. Bakteriofagi: litički i lizogeni fagi; specijalizirana i opća transdukcija; mjesno-specifična rekombinacija
11. Životni ciklus bakteriofaga lambda.
12. Antiviralni mehanizmi: restrikcija i modifikacija, CRISPR.
13. Regulatorne male RNA: miRNA, siRNA, piRNA.
14. Regulacija odgovora na povišenu temperaturu (heat shock response) i proteini čuvari: važnost smatanja proteina, vrste proteina uključenih u odgovor na povišenu temperaturu, regulacija ekspresije ovih gena.

PRAKTIKUM:

Praktikum je zamišljen kao manji projekt u kojem se genetičkom analizom karakteriziraju dva *recC* null mutanta. Jedan mutant sadrži samo mutaciju u genu *recC* kojom nastaje skraćeni protein, a drugi mutant ima dodatnu supresorsku mutaciju u promotorskoj regiji. Usporediti će se fenotipovi dva mutanta određivanjem osjetljivosti na UV zračenje. Zatim će se klonirati kraći i duži oblik gena *recC* što uključuje umnažanje gena metodom PCR, cijepanje restrikcijskim enzimima, ligaciju, transformaciju i odabir klonova plavo-bijelom selekcijom. Pozitivni klonovi (bijeće kolonije) potvrditi će se metodom PCR. Također, utjecaj supresorske mutacije u promotoru će se odrediti mjerenjem količine transkripata gena *recC* metodom qRT-PCR. Ovaj dio vježbe uključuje izolaciju ukupne RNA, određivanje koncentracije RNA, uklanjanje zaostale DNA, priprema razrjeđenja i interpretacija rezultata.

Literatura

• Obavezna literatura:

- 1. L. Snyder, J. E. Peters, T. M. Henkin and W. Champness (Molecular genetics of bacteria): ASM Press, 4th edition, 2013
- 2. J. E. Krebs, E. S. Goldstein, S. T. Kilpatrick (Lewins Genes XI): Jones and Bartlett learning, 2014
- 3. J. W. Dale and S. F. Park (Molecular genetics of bacteria): Wiley; 5th edition, 2010
- 5. Ivana Ivančić Baće: Molekularna genetika. Upute za laboratorijske vježbe. PMF (skripta)
- 6. Friedberg, E.C., Walker, G.C., Siede, E., Wood, R.D., Schultz, R.A. Ellenbergert, T. (DNA repair and mutagenesis): ASM Press, Washington, D.C., 2005
D. L. Nelson, M. M. Cox. Lehninger, Principles of biochemistry. 6th edition., W. H. Freeman & Co. New York 2013.

• **Preporučena literatura:**

- 4. Trun, N., Trempy, J., 2004: Fundamental bacterial genetics. Blackwell Publishing, Oxford. Streips, U.N., Yasbin, R.E., 2000: Modern microbial genetics. John Wiley and Sons Inc., New York
- 7. Odabrani znanstveni radovi s najnovijim dostignućima u području molekularne genetike

Molekularna spektroskopija (227532)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: obavezni
- Semestar: 2

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Tomica Hrenar
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Tomica Hrenar (P, S)

Opis predmeta

Kvantno-mehanička podloga: postulati kvantne mehanike, kvantizacija energijskih razina u teorijskim modelima. Interakcija zračenja s molekulama: apsorpcija, stimulirana i spontana emisije te raspršenje elektromagnetskog zračenja. Rotacijska spektroskopija: model krutog rotora za proučavanje rotacija dvoatomnih i višeatomnih molekula. Vibracijska spektroskopija: modeli harmoničkog i anharmoničkog oscilatora za proučavanje vibracija dvoatomnih i višeatomnih molekula. Elektronska spektroskopija: elektronska stanja molekula. Magnetske rezonancije: nuklearna magnetska rezonancija, elektronska paramagnetska rezonancija.

Literatura

- Obavezna literatura:
 - Tomica Hrenar (2022): Molekularna spektroskopija, elektronička skripta i drugi materijali kolegija dostupni putem Sveučilišnog centra za e-učenje Merlin (<http://merlin.srce.hr>, za pristup je potreban AAI korisnički račun).
 - J. M. Hollas (2004): Modern Spectroscopy, 4th Ed.
 - I. Levine (2009): Physical Chemistry, 6th Ed.
 - P. Atkins, R. Friedman (2005): Molecular Quantum Mechanics, 4th Ed.

Ishodi učenja

1. Objasniti kvantno-mehaničku podlogu za kvantizaciju energijskih razina u teorijskim modelima na temelju postulata kvantne mehanike.
2. Objasniti procese apsorpcije, stimulirane i spontane emisije te raspršenja elektromagnetskog zračenja.

3. Objasniti model krutog rotora za proučavanje rotacija dvoatomnih i višeatomnih molekula.
4. Objasniti modele harmoničkog i anharmoničkog oscilatora za proučavanje vibracija dvoatomnih i višeatomnih molekula.
5. Primjenom teorije grupa povezati simetriju molekula sa simetrijom normalnih načina vibriranja.
6. Objasniti elektronska stanja molekula i osnovne procese prilikom elektronskih prijelaza u molekulama.
7. Objasniti spektroskopije nuklearne magnetske rezonancije i elektronske paramagnetske rezonancije.
8. Razviti generičke vještine prezentacije znanstvenih sadržaja pismeno i usmeno.

Odabrana poglavlja organske kemije (72837)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Vesna Petrović Peroković
 - izv. prof. dr. sc. Ivan Kodrin
- Izvođači:
 - izv. prof. dr. sc. Ivan Kodrin (P, S)
 - prof. dr. sc. Vesna Petrović Peroković (P, S)

Opis predmeta

NASTAVNI SADRŽAJI:

ZAŠTITNE SKUPINE U ORGANSKOJ SINTEZI: Uloga zaštitnih skupina u organskoj sintezi, Zaštita hidroksilnih skupina, Zaštita karbonilnih skupina, Zaštita karboksilnih skupina, Zaštita tiolnih skupina, Zaštita amino skupina, Metode uklanjanja zaštitnih skupina.

STEREOKEMIJA ORGANSKIH MOLEKULA: Stereoizomeri, Simetrija, Konfiguracija, Svojstva i razlikovanje stereoizomera, Heterotopni ligandi i strane (Stereoizomerija, Prokiralnost), Kiralnost molekula bez kiralnih centara, Kirooptička svojstva.

ISHODI UČENJA:

Navesti i objasniti načine, reagense i uvjete za uvođenje i uklanjanje zaštitnih skupina na različite funkcijske skupine.

Napisati mehanizme reakcija uvođenja i uklanjanja zaštitnih skupina.

Definirati i navesti primjere setova ortogonalnih zaštitnih skupina.

Koristiti zaštitne skupine u sintezi organskih spojeva.

Definirati stereokemijske odnose među strukturama te odrediti koja je molekula kiralna, na temelju simetrijskih argumenata.

Odrediti apsolutnu konfiguraciju kod molekula sa stereogenim središtem i kod onih bez stereogenog središta (osna, ravninska i uzvojična kiralnost).

Opisati metode za eksperimentalno određivanje apsolutne i relativne konfiguracije te objasniti principe kirooptičkih metoda.

Odrediti simetrijski ekvivalentne (homotopne, enantiotopne) i neekvivalentne (dijastereotopne, konstitucijski heterotopne) atome i skupine unutar molekule.

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- 1. 1. T. W. Green, P. G. M. Wuts: Protective Groups in Organic Synthesis, John Wiley&Sons, Inc., New York, 1999.
- 2. P. J. Kocienski, Protecting Groups, Thieme, Stuttgart, 2005.
- 3. E. L. Eliel, S. H. Willen, Stereochemistry of Organic Compounds, John Wiley&Sons, Inc., New York, 1999.

- **Preporučena literatura:**

- 2. 1. T. W. Green, P. G. M. Wuts: Protective Groups in Organic Synthesis, John Wiley&Sons, Inc., New York, 1999.
- 2. M. B. Smith, March's Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure, John Wiley & Sons, Inc., New Jersey, 2013.
- 3. F. A. Carey, R. J. Sundberg, Advanced Organic Chemistry: Part A: Structure and Mechanisms, Springer Science & Business Media, New York, 2000.
- 4. Eric V. Anslyn, Dennis A. Dougherty, Modern Physical Organic Chemistry, University Science Books, 2006.
- 5. IUPAC, Commission on Nomenclature of Organic Chemistry, Commission on Physical Organic Chemistry, Basic Terminology of Stereochemistry (Recommendations 1996), Pure & Appl. Chem. 1996, 68, 2193.

Osnove medicinske kemije (270691)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - doc. dr. sc. Željka Car
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Ines Primožič (P)
 - doc. dr. sc. Željka Car (P, S)
 - Alma Ramić, dr. sc. (S)

Opis predmeta

U ovom kolegiju studenti će se upoznati s temeljnim konceptima i pojmovima medicinske kemije. Bit će riječi o dizajnu i metodama optimiziranja struktura potencijalnih lijekova, njihovom djelovanju na biološke mete te podjeli lijekova prema odabranim terapijskim skupinama. Studenti će steći znanja o optimalnim putovima razvoja novog lijeka te će naučiti povezati fizikalno-kemijska svojstva, farmakološku aktivnost, mehanizme djelovanja, i farmakokinetička svojstva lijekova s njihovim kemijskim strukturama.

Ishodi učenja:

1. Nakon polaganja predmeta studenti će moći opisati put razvoja lijeka od njegovog osmišljavanja i dizajna, pronalaska biološki aktivne tvari i vodećeg spoja (engl. lead compound), pretkliničkih i kliničkih istraživanja, do plasiranja lijeka na tržište.
2. Studenti će moći razumijeti osnovne koncepte farmakokinetike, farmakodinamike, SAR i QSAR tehnika.
3. Studenti će znati podijeliti lijekove prema terapijskim skupinama i mehanizmu djelovanja s biološkim makromolekulama.
4. Moći će prepoznati ciljeve djelovanja prolijekova i lijekova.
5. Studenti će znati primijeniti ranije stečeno znanje iz sintetske organske kemije u pripravi biološki aktivnih tvari (prolijekova i lijekova).

Literatura:

1. G. L. Patrick, An Introduction to Medicinal Chemistry, Oxford University Press, 7th Ed., 2023
2. R. B. Silverman, M. W. Holladay, The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action, Academic Press, 3rd Ed., 2015

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- G. L. Patrick (2023): An Introduction to Medicinal Chemistry
- R. B. Silverman, M. W. Holladay (2015): The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action

Ishodi učenja

1. Nakon polaganja predmeta studenti će moći opisati put razvoja lijeka od njegovog osmišljavanja i dizajna, pronalaska biološki aktivne tvari i vodećeg spoja (engl. lead compound), prekliničkih i kliničkih istraživanja, do plasiranja lijeka na tržište.
2. Studenti će moći razumijeti osnovne koncepte farmakokinetike, farmakodinamike, SAR i QSAR tehnika.
3. Studenti će znati podijeliti lijekove prema terapijskim skupinama i mehanizmu djelovanja s biološkim makromolekulama.
4. Moći će prepoznati ciljeve djelovanja prolijekova i lijekova.
5. Studenti će znati primijeniti ranije stečeno znanje iz sintetske organske kemije u pripravi biološki aktivnih tvari (prolijekova i lijekova).

Primijenjena vibracijska spektroskopija (44002)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Snežana Miljanić
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Snežana Miljanić (P, S)

Opis predmeta

NASTAVNI SADRŽAJ:

Elektromagnetsko zračenje, vibracije molekula. Disperzijski i Fourier transform infracrveni spektrometri. Metode transmisije (spektroskopija u bliskom, srednjem i dalekom infracrvenom području), metode unutarnje i vanjske refleksije (prigušena totalna refleksija, zrcalna i difuzna refleksija), fotoakustična spektroskopija, emisijska infracrvena spektroskopija, infracrvena mikroskopija, vezani sustavi (kromatografija - infracrvena spektroskopija, termička analiza - infracrvena spektroskopija). Analiza i asignacija infracrvenih spektara organskih i anorganskih molekula. Primjena infracrvene spektroskopije u analizi polimera i bioloških uzoraka te u industriji i okolišu.

Raspršeno zračenje, polarizirano zračenje. Disperzijski i Fourier transform Ramanovi spektrometri. Ramanova spektroskopija, spektroskopija rezonantnog Ramanovog raspršenja, spektroskopija površinski pojačanog (rezonantnog) Ramanovog raspršenja, Ramanova mikroskopija, metode nelinearne Ramanove spektroskopije (hiper Ramanova spektroskopija, spektroskopija koherentnog anti-Stokesovog Ramanovog raspršenja). Primjena Ramanove spektroskopije u analizi minerala, polimera, boja i bioloških uzorka te u umjetnosti, arheologiji, forenzici i industriji.

ISHODI UČENJA:

Objasniti interakciju elektromagnetskog zračenja s tvari u IR i Ramanovoj spektroskopiji.

Opisati tehnike IR spektroskopije koje se temelje na transmisiji, refleksiji i emisiji zračenja.

Opisati tehnike normalne, rezonantne te površinski pojačane Ramanove spektroskopije.

Razlikovati disperzivnu spektroskopiju i spektroskopiju s Fourierovim transformacijama.

Poznavati princip oslikavanja i mapiranja uzoraka pomoću vibracijske mikrospektroskopije.

Opisati pripravu uzoraka za kvalitativna i kvantitativna mjerenja ovisno o svojstvima uzoraka i vibracijskoj metodi.

Interpretirati infracrvene i Ramanove spektre.

Poznavati primjenu vibracijske spektroskopije u analizi realnih uzoraka, primjerice polimera, boja, papira, bioloških uzoraka, lijekova, prehrambenih proizvoda te raznovrsnih uzoraka iz industrije i okoliša.

Odabrati pogodnu tehniku vibracijske spektroskopije za analizu odgovarajućeg uzorka.

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- 1. 1. B. Schrader (Ur.), Infrared and Raman Spectroscopy: Methods and Applications, Wiley-VCH, Weinheim, 1995.
- 2. Günzler, H.-U. Gremlich, Uvod u infracrvenu spektroskopiju, Školska knjiga, Zagreb, 2006.
- 3. E. Smith, G. Dent, Modern Raman Spectroscopy: A Practical Approach, John Wiley & Sons, Inc., Chichester, 2005.

- **Preporučena literatura:**

- 2. 1. B. Stuart, Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications, John Wiley & Sons, Chichester, 2004.
- 2. R. Aroca, Surface-enhanced Vibrational Spectroscopy, John Wiley & Sons, Chichester, 2005.
- 3. J.M. Chalmers, P.R. Griffiths (ur.), Handbook of Vibrational Spectroscopy, John Wiley & Sons, 2001.

Proteinska kristalografija (198315)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S) + 15(V)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - doc. dr. sc. Ivana Kekez
- Izvođači:
 - doc. dr. sc. Ivana Kekez (P, S, V)

Opis predmeta

ISHODI UČENJA:

1. Objasniti fizikalne temelje difrakcije na kristalu.
2. Objasniti metode određivanja kristalne strukture proteina.
3. Izvesti eksperiment kristalizacije proteina.
4. Primijeniti osnovne metode rješavanja i utočnjavanja struktura proteina.
5. Koristiti se bazama riješenih struktura bioloških makromolekula.

PREDAVANJA:

1. Makroskopska svojstva kristala.
2. Osnove simetrije u kristalima; Millerovi indeksi, točkine grupe.
3. Kristalne rešetke.
4. Prostorne grupe.
5. Osnovni principi difrakcije na monokristalima; Braggov zakon
6. Metode kristalizacije proteina.
7. Izvori i detektori rentgenskog zračenja.
8. Fourierova sinteza; problem faza.
9. Metode sakupljanja difrakcijskih podataka.
10. Proteinske baze podataka.
11. Osnovne metode određivanja kristalne strukture proteina.
12. Izrada modela i utočnjavanje strukture
13. Analiza riješene strukture.

SEMINAR:

Samostalno rješavanje, utočnjavanje, analiziranje i vizualizacija dodijeljene strukture biološke makromolekule i prezentiranje rješenja.

VJEŽBE:

1. Kristalizacija odabranog proteina metodom difuzije para u visećoj kapi.
2. Odabir kristala i sakupljanje difrakcijskih podataka.
3. Procesiranje podataka i rješavanje kristalne strukture odabrane biološke makromolekule korištenjem metode molekulske zamjene.

4. Utočnjavanje kristalne strukture odabrane biološke makromolekule.
5. Analiza i vizualizacija strukture odabrane biološke makromolekule.

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- Bernard Rupp (2009): Biomolecular Crystallography: Principles, Practice, and Application to Structural Biology

- **Preporučena literatura:**

- Jan Drenth (2007): Principles of Protein X-Ray Crystallography
- W. Clegg (2002): Crystal Structure Determination
- Carmelo Giacovazzo (ed.), Carmelo Giacovazzo, Hugo Luis Monaco, Gilberto Artioli, Davide Viterbo, Marco Milanese, Gastone Gilli, Paola Gilli, Giuseppe Zanotti, Giovanni Ferraris, Michele Catti (2011): Fundamentals of Crystallography

Radioanalitičke metode (43973)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - doc. dr. sc. Ivan Nemet
- Izvođači:
 - doc. dr. sc. Ivan Nemet (P)
 - Nikolina Ilić, mag. chem. (S)

Opis predmeta

SADRŽAJ PREDMETA: Osnovni pojmovi potrebni za razumijevanje pojave radioaktivnosti. Interakcija zračenja i materije. Izvori nuklearnog zračenja, detekcija i mjerenje ionizirajućeg zračenja. Primjena radioaktivnih izotopa u analitičkoj kemiji: aktivacijske te radioimunološke analize, nuklearne mikroanalize, metode izotopnog razrjeđenja, automatizirane radiokemijske separacije, analiza radionuklida masenom spektrometrijom. Tehnike pripreme uzoraka za analizu. Statistička obrada podataka. Radijacijsko-kemijski procesi s osvrtom na biološko djelovanje ionizirajućeg zračenja. Zaštita od ionizirajućeg zračenja. Nova znanstvena otkrića u području radioanalize.

ISHODI UČENJA: 1. Pokazati poznavanje osnovnih teorijskih i primjenjenih značajka radiokemije. 2. Opisati kemijska i fizikalna svojstva radionuklida. 3. Navesti i objasniti biološke efekte radioaktivnih tvari. 4. Karakterizirati ekološke probleme koje uzrokuje radioaktivnost.

Literatura

- Obavezna literatura:
 - 2. K.-H. Lieser, Nuclear- and Radiochemistry (Fundamentals and Applications) Wiley-VCH Verlag GmbH, 2001.
 - 3. D. M. L Annunziata, HANDBOOK OF RADIOACTIVITY ANALYSIS (Second Edition) Elsevier, Academic Press, NewYork, 2003.
 - 4. INTERNA SKRIPTA Sav materijal izložen na predavanjima, dostupan je prije predavanja u tiskanom obliku, te ga student može kopirati.
- Preporučena literatura:
 - 1. V. Paić, G. Paić, Osnove radijacijske dozimetrije i zaštite od zračenja, Liber, Zagreb, 1983. 2. W. D. Ehmann, D. E. Vance, Radiochemistry and Nuclear Methods of Analysis, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1991.

- 5. S. J. Parry, Activation Spectrometry in Chemical Analysis, John Wiley Sons (1991)
- 6. G. Choppin, J-O- Liljezin, J. Rydberg, Radiochemistry and Nuclear Chemistry, 2nd, Butterworth-Heinemann, 2002

Računalna kemija (43983)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - izv. prof. dr. sc. Ivan Kodrin
- Izvođači:
 - izv. prof. dr. sc. Ivan Kodrin (P, S)

Opis predmeta

Upoznavanje naprednijih metoda molekularnog modeliranja. Pregled i usporedba metoda, računalnih programa, optimizacijskih tehnika. MO i VB teorije. HF jednadžbe, Roothanove jednadžbe. Osnovni skupovi. Kanonske molekularne orbitale, lokalizacija molekularnih orbitala. Elektronska korelacija. MC-SCF, perturbacijska teorija, konfiguracijska interakcija, metoda spregnutih grozdova. DFT. Populacijska analiza: Lowdinova, NBO i AIM metoda. NRT. Napredno pretraživanje plohe potencijalne energije, stacionarne i infleksijske točke. IRC. Računanje termodinamičkih veličina. Pobuđena stanja. Vibracijski, elektronski, NMR spektri. Napredna solvatacija. Metode simuliranja sustava s velikim brojem atoma: Monte-Carlo metode i molekularna dinamika.

SHODI:

Objasniti temeljne metode i provesti račune koji uključuju korelaciju.

Pronaći i karakterizirati stacionarne i infleksijske točke te reakcijske staze na plohi potencijalne energije.

Provesti detaljnu analizu valne funkcije koristeći QTAIM i NBO metode.

Provesti računanje pobuđenih stanja i molekularnih spektara.

Demonstrirati poznavanje rada s naprednim računalnim metodama za molekularno modeliranje.

Literatura

- Obavezna literatura:
 - 2. A. R. Leach, Molecular Modelling, Principles and Applications, 2. izdanje, Longman, 2001.
 - 3. C. J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, 2. izdanje, Wiley, 2004.
 - 4. F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, 2. izdanje, Wiley, 2007.
- Preporučena literatura:

- 5. E. G. Lewars, Computational chemistry. Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics, 2nd edition, Springer, 2011.
- 6. S. M. Bachrach, Computational Organic Chemistry, Wiley, 2007.

Sinteza u anorganskoj kemiji (44014)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: nepoznato
- Semestar:

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Višnja Vrdoljak
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Višnja Vrdoljak (P, S)

Opis predmeta

Osnovni tipovi reakcija u anorganskoj kemiji;

Reakcije pri povišenoj temperaturi a) u plinovitom stanju, b) u prisutnosti otapala-vodeni i nevodeni medij-taline soli, c) u čvrstom stanju

Solvotermalna (hidrotermalna) sinteza; Interkalacija

Sinteza anorganskih spojeva u inertnoj atmosferi;

Elektroliza u anorganskoj sintezi;

Sinteza uz primjenu mikrovalnog zračenja

Kompleksni spojevi; templatna sinteza

KOordinacijski polimeri- izabrani primjeri; Organometalni spojevi - izabrani primjeri; Klusteri - izabrani primjeri - Na seminarima se obrađuju tema iz znanstvenih radova o čemu referiraju sami studenti

ISHODI:

1. Opisati tehnike sinteze anorganskih materijala (visoko-temperaturni postupci u čvrstom stanju, CVD i PVD postupci).
2. Opisati moderne tehnike sinteze anorganskih i organometalnih spojeva uključujući Schlenkovu i vakuumsku liniju, sovotermalnu metodu, ultrazvukom i mikrovalnim zračenjem potpomognutu sintezu.
3. Opisati 'zelene' postupke sinteze.
4. Planirati sintetski put do ciljnih anorganskih i organometalnih spojeva.
5. Objasniti upotrebu određene tehnike za pripremu odgovarajuće vrste anorganskih spojeva.
6. Održati izlaganje na zadanu temu sinteze tvari iz područja anorganske kemije i materijala.
7. Analizirati znanstveni članak s naglaskom na jednu od tehnika iz područja sinteze.

Literatura

- Obavezna literatura:

- 1. 1. J. E. Huheey, E. A. Keiter, R. L. Keiter, *Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*, 4. izd., Harper Collins College Publishers, New York, 1993. 2. G. S. Girolami, T. B. Rauchfuss, R. J. Angelici, *Synthesis and Technique in Inorganic Chemistry*, 3. izd., University Science Books, Sausalito, 1999. 3. P. J. Van der Put, *The Inorganic Chemistry of Materials*, Plenum Press, New York, 1998.
- 2. G. S. Girolami, T. B. Rauchfuss, R. J. Angelici: *Synthesis and Technique in Inorganic Chemistry*, 3. izd., University Science Books, Sausalito, 1999.
- 4. 1. R. H. Crabtree, *The Organometallic Compounds of the Transition Metals*, 2nd Ed., John Wiley&Sons, New York, 2004. 2. D.F. Shriver, P. W. Atkins, C. H. Langford, *Inorganic Chemistry*, 2nd Ed., Oxford University Press, Oxford, 1994.

• **Preporučena literatura:**

- 3. P. J. Van der Put: *The Inorganic Chemistry of Materials*, Plenum Press, New York 1998.

Spektroskopska strukturna analiza (44004)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Predrag Novak
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Predrag Novak (P, S)
 - izv. prof. dr. sc. Tomislav Jednačak (S)

Opis predmeta

Elektromagnetno zračenje. Spektar elektromagnetnog zračenja. Interakcija elektromagnetnog zračenja i molekula. Apsorpcija, emisija, raspršenje. Osnovni principi NMR, IR i UV spektroskopije i spektrometrije masa. Strukturni parametri i izomerija. Funkcionalne skupine i njihova spektralna svojstva. Jedno- i dvodimenzijske NMR tehnike i interpretacija spektara. IR i Ramanovi spektri-skupinske vibracije. Spektri masa- fragmentacija i ioni. UV spektri-kromofori. Pristupi rješavanju strukturnih problema. Razumijevanje načina interpretacije spektara. Stupnjevi u određivanju strukture molekula. Interaktivno povezivanje podataka iz NMR, IR, MS i UV spektara. Molekulska formula, funkcijske skupine, podstrukture, radne strukture. Identifikacija molekula, 2D molekulska struktura, konformacija i konfiguracija. Principi u rješavanju 3D strukture molekula kombinacijom NMR tehnika i molekulskog modeliranja. ISHODI: - poznavati i razumijeti koncepte spektroskopskih metoda za strukturnu analizu spojeva - razviti sposobnosti i vještine za rješavanje strukture molekula - Razumijeti načine interpretacije spektara - usporediti prednosti i mane pojedinih spektroskopskih metoda u rješavanju strukture molekula - odabrati najprikladniji pristup za rješavanje 2D i 3D strukture molekula - primijeniti stečena znanja u znanstveno-istraživačkom radu - uključiti se u rad interdisciplinarnog znanstvenog tima

Literatura

- Obavezna literatura:
 - 1. P. Novak i T. Jednačak, Strukturna analiza spojeva spektroskopskim metodama, TIVA Tiskara, Varaždin, 2013.
 - 2. R. M. Silverstein, F. X. Webster, D. J. Kiemle Spectrometric Identification of Organic Compounds, John Wiley & Sons, New York, 2005.
 - 3. E. Pretch, P. Bühlmann i C. Affolter: Structure Determination of Organic Compounds-Tables of spectral data, Springer, Berlin, 2009.

- 4. L.D.Field, S. Sternhell, J.R. Kalman, Organic Structures from Spectra, Wiley, Chichester, 2004.

- **Preporučena literatura:**

- 5. T. D. W. Claridge, High Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry, Pergamon, Amsterdam, 2009.
- 6. E. de Hoffman, V. Stroobant, Mass Spectrometry-Principles and Applications, Wiley, Chichester, 2003 scientific papers

Stanična biokemija (72839)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - doc. dr. sc. Morana Dulić
- Izvođači:
 - doc. dr. sc. Morana Dulić (P, S)

Opis predmeta

Ekspresija gena: - struktura kromosoma, organizacija genoma, kontrola ekspresije ? bakterije, eukarioti. Stanična membrana: - transport tvari kroz membranu, prijenos signala u stanici. Sinteza i sortiranje membranskih lipida, sortiranje proteina. Biogeneza organela: - mitohondrija, kloroplasta, peroksisoma, jezgre. Signalizacija između stanica: hormoni i receptori, čimbenici rasta. Živčane stanice: prijenos signala (akcijski potencijal), neurotransmitori i receptori, osjetila (vid, sluh, njuh, okus). Regulacija staničnog metabolizma. Pokretljivost stanice i kontrola staničnog oblika: aktin, miozin, mišići, aktin i miozin u ne-mišićnim stanicama. Mikrotubuli (kinezin, diemin i intracelularni transport, dinamika mikrotubula i motornih proteina). Multicelularnost: interakcije stanica-stanica, interakcija stanice sa staničnim matriksom, embriogeneza, stvaranje organa i organizacija tkiva. Regulacija staničnog ciklusa: mitotička, mejoza. Stanična smrt i matične stanice: apoptoza, nekroza, embriološke matične stanice, matične stanice koštane srži. Kancerogeneza: onkogeni, DNA virusi, onkorna virusi, kemijska i radijacijska karcinogeneza, popravak oštećenja. Imunost. Biokemija upalnog procesa.

ISHODI: 1. Objasniti i razlikovati posttranslacijske modifikacije proteina. 2. Navesti i objasniti gdje i kako dolazi do posttranslacijskih modifikacija proteina. 3. Definirati kako dolazi do asimetrije lipidnog dvosloja membrana. 4. Objasniti i razlučiti zašto se proteini razvrstavaju u pojedine stanične odjeljke. 5. Opisati građu i vrstu molekula koje sudjeluju u procesima prijenosa signala. 6. Objasniti proces signalizacije kojim se aktiviraju metabolički procesi u citoplazmi i mitohondrijima. 7. Definirati kako se prenose signali kojima se aktivira transkripcija gena. 8. Objasniti i opisati građu citoskeleta. 9. Opisati kako citoskelet regulira i sudjeluje u kretanju stanica. 10. Razlikovati faze staničnog ciklusa te objasniti načine kontrole staničnog ciklusa. 11. Navesti i razlikovati vrste adhezijskih molekula kao i adhezije i interakcije stanica-stanica kao i stanica-izvanstanični matriks. 12. Objasniti što su matične stanice. 13. Opisati kako iz diferencirane stanice može nastati inducirana pluripotentna matična stanica. 14. Objasniti što je apoptoza. 15. Objasniti i razlikovati načine aktivacije apoptoze. 16. Objasniti kako dolazi do živčanog podražaja. 17. Opisati građu i prijenos signala u živčanoj sinapsi. 18. Razlikovati stečenu od prirodene imunosti. 19. Objasniti građu imunološke sinapse. 20. Objasniti kako dolazi do tumorskih stanica i kako dolazi do metastaza.

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- 1. H. Lodish, C. A. Kaiser, A. Bretscher, A. Amon, A. Berk, M. Krieger, H. Ploegh, M. P. Scott: Molecular Cell Biology, Macmillan and W. H. Freeman and Company, New York, 2013, 7th edition. B. Alberts, A. Johnson, J. Lewis, M. Raff, K. Roberts, P. Walter: Molecular Biology of the Cell, Garland Publishing, Inc; New York, 2008, 5th edition, Garland Science, New York, SAD.

- **Preporučena literatura:**

- 2. G. M. Cooper, R. E. Hausman: Stanica-molekularni pristup, Medicinska naklada, Zagreb, 2004 D. Voet, J. G. Voet: Biochemistry, J. Wiley & Sons, Inc; New York, Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore, 2011, 4th edition D. L. Nelson, M. M. Cox: Lehninger Principles of Biochemistry, Macmillan and W. H. Freeman, New York, 6th edition, 2013.

Strukturna računalna biofizika (198314)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 15(P) + 30(V)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Branimir Bertoša
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Branimir Bertoša (P)
 - Matej Kožić, univ. mag. chem. (V)

Opis predmeta

Literatura:

B. Bertoša, A. Hloušek-Kasun. N. Mrnjavac Molekulsko modeliranje biomakromolekula, Kemijski odsjek, PMF, Zagreb, 2020
A.R. Leach Molecular Modelling: Principles and Applications, Prentice Hall, 2001
C. J. Cramer Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, J. Wiley, Chichester, 2004

Literatura

- Obavezna literatura:
 - B. Bertoša, A. Hloušek-Kasun. N. Mrnjavac (2020): Molekulsko modeliranje biomakromolekula
 - A.R. Leach (2001): Molecular Modelling: Principles and Applications
- Preporučena literatura:
 - C. J. Cramer (2004): Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models

Stručna praksa (212150)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 120(V)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - izv. prof. dr. sc. Nikola Bregović
 - izv. prof. dr. sc. Jana Pisk
- Izvođači:
 - izv. prof. dr. sc. Jana Pisk (V)
 - izv. prof. dr. sc. Nikola Bregović (V)

Opis predmeta

Kolegij stručna praksa ima za cilj povezati studente s potencijalnim budućim poslodavcima, kroz obavljanje praktičnog rada kod poslodavaca s kojima je PMF prethodno potpisao ugovor o suradnji. Kroz obavljanje stručne prakse studentima će se omogućiti produbljivanje i proširivanje znanja i vještina stečenih kroz teorijsko i praktično obrazovanje stečeno u klasičnom obliku nastave te ih upoznati s radnim procesima u realnom radnom okruženju kao i pripremiti za svijet rada.

Ishodi učenja

1. upoznati detaljnije rad ustanova i tvrtki koje predstavljaju bazu za zapošljavanje magistara kemije
2. samostalno planirati i izvoditi složenije laboratorijske postupke
3. samostalno koristiti znanstvenu i stručnu literaturu te ostale relevantne izvore informacija
4. primijeniti statističke i grafičke metode u analizi i prezentaciji rezultata
5. prezentirati znanstvene sadržaje usmeno i u pisanom obliku
6. odgovorno i uskladu s pravilima struke pristupiti provođenju i izvršavanju radnih zadataka

Teorijska kemija (72796)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Tomica Hrenar
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Tomica Hrenar (P, S)

Opis predmeta

Matematičke podloge teorijske kemije: matematički uvod, višeelektronske valne funkcije, Born-Oppenheimerova aproksimacija, Paulijevo načelo isključenja, Slaterova determinanta, operatori i matrični elementi, druga kvantizacija, matrice gustoće. Hartree-Fockova teorija: izvodi jednadžbi, interpretacija rješenja, ograničena HF-metoda zatvorene ljuske, ograničena i neograničena HF-metoda otvorene ljuske, SCF teorija, Roothaan-Hallove jednadžbe, daljnji aspekti. Skupovi osnovnih funkcija: Orbitale Slaterovog i Gaussovog tipa, klasifikacija, polarizacijske i difuzne funkcije, even- i well-tempered skupovi, kontrahirani BS, Popleovi, Dunning-Huzinagini, prirodne atomske orbitale, korelacijski konzistentni i polarizacijski konzistentni BS, ekstrapolacija, BSSE, pseudopotencijali. Konfiguracijska interakcija: konfiguracijski razvoj, konvencionalni CI-pristup, dijagonalizacija i direktne CI-jednadžbe, kompletna i aproksimativne CI-metode, size consistency. Multikonfiguracijska teorija samouskladenog polja: MCSCF valna funkcija, gradijent, Hessijan, metoda kompletnog aktivnog prostora, primjene. Teorija spregnutih grozdova: model spregnutih grozdova, eksponencijalni ansatz, size extensivity, model CCSD, viša pobuđenja, CC-metode otvorene ljuske, ostali postupci tretiranja size extensivity. Perturbacijska teorija: primjene, Rayleigh-Schrödinger, Möller-Plesset i MC perturbacijska teorija, perturbacijska teorija spregnutih grozdova. Teorija funkcionala gustoće: elektronska gustoća, Hohenberg-Kohnovi teoremi, izmjensko-korelacijski funkcionali, aproksimacija lokalne gustoće, generalizirana aproksimacija gradijenta, hibridni funkcionali, Kohn-Shamova teorija. Lokalne metode elektronske korelacije: lokalizacija, lokalizirane molekulske orbitale, Boysova i Pipek-Mezeyeva lokalizacija, lokalna korelacija, lokalne Möller-Plessetove metode. Teorija analitičkih gradijenata: svojstva izračunata kao derivacije, derivacije energije za HF valnu funkciju, molekularni gradijenti za nevarijacijske valne funkcije. Optimizacija geometrije: stacionarne točke, lokalni modeli, strategija minimizacije, konvergencijski kriteriji, optimizacija u sedlaste točke. Točni kvantno-kemijski proračuni: pogreške, kalibracija metoda, izbor skupa osnovnih funkcija, ukupna elektronska energija, kemijske reakcije, vibracijski spektri, termodinamička svojstva, efekti otapala, relativistički članovi Hamiltonijana.

ISHODI:

1. napisati Schrödingerovu jednadžbu za molekule, objasniti Born-Oppenheimerovu aproksimaciju, Paulijevo načelo i varijacijsku metodu te relacije potpunosti baze.
2. izvesti Hartree-Fockove jednadžbe i interpretirati rješenja za ograničenu HF-metodu zatvorene ljuske te ograničenu i neograničenu HF-metodu otvorene ljuske.
3. prikazati skupove osnovnih funkcija i pseuodopotencijale koje se koriste u kvantnoj kemiji. Na primjerima objasniti superpozicijsku pogrešku skupa osnovnih funkcija.
4. prikazati osnovne jednadžbe konfiguracijske interakcije i aproksimativne metode. Objasniti pojmove size consistency i size extensivity.
5. prikazati osnovne jednadžbe teorije spregnutih grozdova.
6. objasniti primjenu perturbacijske teorije u kvantnoj kemiji.
7. prikazati teoriju analitičkih gradijenata i objasniti kako se računaju svojstva molekula.
8. definirati pojmove stacionarna i sedlasta točka. Prikazati algoritme za optimizaciju geometrije i konvergencijski kriteriji.
9. prikazati osnovne principe točnih kvantno-kemijskih proračuna uz procjenu pogreške. Objasniti moguća poboljšanja hamiltonijana.
10. prezentirani znanstvene sadržaje pismeno i usmeno.

Literatura

• Obavezna literatura:

- 1. 1. T. Hrenar: Teorijska kemija, rkp. u pripremi i dijelom dostupan putem Sveučilišnog centra za e učenje Merlin (<http://merlin.srce.hr>, za pristup je potreban AAI korisnički račun). 2. T. Helgaker, P. Jorgensen, J. Olsen: Molecular Electronic-Structure Theory, Wiley, Chichester, 2000. 3. I. N. Levine: Quantum Chemistry, 5th Ed., Prentice Hall, New Jersey, 2000. 4. A. Szabo and N. S. Ostlund: Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory, Dover Publications, Inc., Mineola, New York 1996. 5. R. McWeeny: Methods of Molecular Quantum Mechanics, 2th Ed., Academic Press, San Diego, 2001. 6 L. Pauling and E. B. Wilson, Jr.: Introduction to Quantum Mechanics With Applications to Chemistry, Dover Publications, Inc., New York 1985.

Upravljanje kvalitetom u analitičkom laboratoriju (43997)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Iva Juranović Cindrić
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Iva Juranović Cindrić (P, S)

Opis predmeta

Izvedbene značajke mjernog postupka u analzi okoliša (zrak, voda, tlo), analizi hrane, farmaceutici, forenzici i kliničkoj kemiji: uzorak (uzorkovanje priprava i obrada uzoraka), kriteriji za odabir i validaciju analitičke metode (osjetljivost, selektivnost, specifičnost metode, detekcijske granice), interferencije. Međudnevna preciznost. Referencijski materijali i kalibracijski postupci. Kriteriji za određivanje procjene mjerne nesigurnosti spektroskopskih, kromatografskih, imunokemijskih, radiokemijskih i elektrokemijskih metoda. Obrada rezultata. Norme i normizacija (primjena norme HRN EN ISO/IEC 17025). Akreditacija laboratorija.

ISHODI UČENJA:

- objasniti pojmove i značenje postupaka validacije analitičke metode
- opisati različite načine uzorkovanja i priprave uzorka
- objasniti prednosti i nedostatke različitih metoda uzorkovanja
- izabrati i primjeniti najpogodniji kalibracijski postupak i statistički ga opisati u svrhu dobivanja kvantitativnog podatka o analitu
- definirati izvedbene značajke mjernog analitičkog postupka
- primjeniti osnovne statističke postupke na rezultate mjerenja
- definirati elemente sustava kvalitete u laboratoriju
- znati kako izgraditi sustav kontrole kvalitete u laboratoriju
- objasniti temeljne postavke vođenja projekta
- navesti kako pravilno objasniti i opisati rezultate umjeravanja/ispitivanja i predložiti izradu validacijskog protokola i izvještaja, priručnika za kvalitetu te radnih uputa
- pronaći i interpretirati informacije u korisnim nacionalnim i međunarodnim dokumentima (HRN EN ISO/IEC 17025, ILAC, EA, IUPAC, Eurolab, itd.)
- razumjeti važnost i zahtjeve za akreditaciju laboratorija

Literatura

- Obavezna literatura:

- 1. 1. M. Kaštelan-Macan, Kemijska analiza u sustavu kvalitete, Školska knjiga, Zagreb 2003.
- 2. P. De Bievre i H. Guenzler, Validation in Chemical Measurement, Springer-Verlag, Berlin 2005.
- 3. P. De Bievre i H. Guenzler, Measurement Uncertainty in Chemical Analysis, Springer-Verlag, Berlin 2003.

Vezani sustavi u analitičkoj kemiji (44005)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Nives Galić
 - prof. dr. sc. Predrag Novak
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Nives Galić (P, S)
 - prof. dr. sc. Predrag Novak (P, S)

Opis predmeta

ISHODI:

Objasniti prednosti vezanih sustava u analizi uzorka složenog sastava.

Objasniti povezivanje plinske kromatografije i spektrometrije masa.

Objasniti povezivanje tekućinske kromatografije i spektrometrije masa.

Razumijeti i objasniti povezivanje tekućinske kromatografije i spektroskopije NMR

Usporediti spektrometar masa, infracrveni spektrometar i spektrometar NMR kao detektore u vezanim sustavima.

Odabrati prikladnu metodu za on-line analizu uzoraka različitog porijekla i složenosti.

NASTAVNI SADRŽAJI:

Principi i osnovni pojmovi vezanih sustava. Sustavi odjeljivanja. Tekućinska kromatografija. Plinska kromatografija. Najčešće vrste detektora. On-line povezivanje sustava odjeljivanja i sustava detekcije; LC-UV, LC-NMR, LC-MS, GC-MS. Prednosti i nedostaci vezanih sustava. Osjetljivost i učinkovitost. Primjena vezanih sustava u analizi prirodnih spojeva i biomolekula, metabolita lijekova i onečišćenja prisutnih u gotovim proizvodima.

Literatura

- Obavezna literatura:
 - 1. K. Albert, On-line LC-NMR and Related Techniques, Wiley, 2002.
 - 2. R. Willoughby, E. Sheehan, S. Mitrovich, A Global View of LC/MS, Global View Publishing, Pittsburgh, Pennsylvania, 1998.
 - 2. R. Willoughby, E. Sheehan, S. Mitrovich: A Global View of LC/MS, Global View Publishing, Pittsburgh, Pennsylvania, 1998.

Višedimenzijska NMR spektroskopija (44006)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Predrag Novak
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Predrag Novak (P)
 - dr. sc. Katarina Pičuljan (S)

Opis predmeta

Osnovni principi nuklearne magnetne rezonancije. Spin jezgre i rezonancija. Pulsni NMR. Vremenska i frekvencijska domena. Vektorski model. Interakcije spinova jezgri. Koherencija. Prijenos polarizacije. Uloga i značaj gradijenata magnetnog polja. Tehnike dvostruke rezonancije i višepulsne jednodimenzijske tehnike. Korelacijske tehnike. Direktne i indirektno dvodimenzijske tehnike. Nuklearni Overhauserov efekt. Homonuklearne dvodimenzijske tehnike: COSY, DQCOSY, NOESY, trNOESY, ROESY, TOCSY. Heteronuklearne dvodimenzijske tehnike: HETCOR, HMQC, HSQC, HMBC, HSQC-TOCSY. NMR u čvrstom stanju. Primjena višedimenzijskih tehnika u određivanju 2D strukture organskih i biomolekula. NMR i konformacijska analiza. Primjena NMR tehnika (difuzijska NMR spektroskopija, tehnike prijenosa zasićenja i tehnike "SAR by NMR") u istraživanju interakcija među molekulama uključujući i makromolekule; proteine i nukleinske kiseline. ISHODI: - poznavati koncepte jedno- i višedimenzijskih metoda i tehnika NMR - samostalno interpretirati i analizirati jedno- i višedimenzijske spektre NMR - primijeniti višedimenzijske tehnike u određivanju 2D strukture organskih i biomolekula - usporediti prednosti i mane spektroskopije NMR prema sličnim metodama strukturne analize - primijeniti stečena znanja u znanstveno-istraživačkom radu - steći vještinu u prezentaciji znanstvenih sadržaja vezanih uz primjenu spektroskopije NMR pismeno i usmeno

Literatura

- Obavezna literatura:
 - 1. D. W. Claridge, High Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry, Elsevier, Amsterdam, 2009.
 - 2. P. Novak i T. Jednačak, Strukturna analiza spojeva spektroskopskim metodama, TIVA Tiskara, Varaždin, 2013.

- 3. H. Friebolin, Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy, VCH, Weinheim, 2005.
- 4. J. Keeler, Understanding NMR Spectroscopy, Wiley, Chichester, 2010.

• **Preporučena literatura:**

- 5. W.R. Croasmun, R.M.K. Carlson, Two-dimensional NMR spectroscopy- Application for chemists and biochemists, VCH, Cambridge, 1994.
- 6. Solid state NMR spectroscopy Principles and Applications, ed. M.J. Duer, Wiley, 2007.
- 7. S. Berger i S. Braun, 200 and More NMR Experiments, Wiley-VCH, Weinheim, 2004. scientific papers

Viši praktikum analitičke kemije 1 (43995)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 60(V)
- Obavezni/izborni: obavezni
- Semestar: 1

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - izv. prof. dr. sc. Adriana Kendel
- Izvođači:
 - doc. dr. sc. Ivan Nemet (V)
 - dr. sc. Marijana Pocrnić (V)
 - Nikolina Ilić, mag. chem. (V)
 - izv. prof. dr. sc. Adriana Kendel (V)
 - dr. sc. David Klarić (V)

Opis predmeta

NASTAVNI SADRŽAJ:

Vježbe Višeg praktikuma analitičke kemije 1 temelje se na analizi različitih realnih uzoraka primjenom odgovarajućih tehnika pripreme uzoraka za analizu i suvremenih instrumentnih analitičkih metoda.

1. Plamena fotometrija: Određivanje natrija u jabukama i jabučnom soku nakon mikrovalno potpomognutog razaranja
2. Atomska emisijska spektroskopija uz induktivno spregnutu plazmu (ICP-AES): Određivanje elemenata u jabukama i jabučnom soku
3. Ultraljubičasta i vidljiva (UV/Vis) apsorpcijska spektroskopija: Određivanje kofeina i benzojeve kiseline u energetsom piću
4. Fluorescencijska spektroskopija: Određivanje fluoresceina u antifrizu
5. Infracrvena (IR) spektroskopija: Identifikacija polimerne ambalaže za recikliranje
6. Ramanova spektroskopija: Određivanje limunske kiseline u šumećoj tableti vitamina C
7. Tekućinska kromatografija visoke djelotvornosti (HPLC): Određivanje kofeina i benzojeve kiseline u energetsom piću

ISHODI UČENJA:

Analizirati realne uzorke instrumentnim analitičkim metodama.

Pripraviti uzorak za analizu mikrovalno potpomognutim razaranjem.

Kvantitativno odrediti metale plamenom fotometrijom i atomskom emisijskom spektroskopijom.

Kvantitativno odrediti odabrane spojeve u tekućim uzorcima UV/Vis spektroskopijom.

Kvantitativno odrediti odabrane spojeve u tekućim uzorcima spektrofotometrijom.

Identificirati uzorke organskog sastava infracrvenom spektroskopijom.

Kvalitativno i kvantitativno odrediti odabrane organske spojeve Ramanovom spektroskopijom.
Kvalitativno i kvantitativno odrediti odabrane organske spojeve tekućinskom kromatografijom visoke djelotvornosti.

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- 1. 1. Viši praktikum analitičke kemije 1 (interna skripta)
- 2. D.A. Skoog, F.J. Holler, S.R. Crouch, Principles of instrumental analysis, Thomson Brooks/Cole, Belmont CA, 2006.

Viši praktikum analitičke kemije 2 (44001)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 60(V)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Nives Galić
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Nives Galić (V)
 - dr. sc. Marijana Pocrnić (V)
 - izv. prof. dr. sc. Adriana Kendel (V)
 - dr. sc. David Klarić (V)

Opis predmeta

NASTAVNI SADRŽAJ:

U okviru Višeg praktikuma analitičke kemije 2 student odabire jednu od ponuđenih tema istraživanja iz analitičke kemije koje su ili dio znanstvenog istraživanja u tijeku ili razrada odgovarajućih metoda analize. Uz nadzor asistenta student samostalno provodi istraživanje, koje obuhvaća pregled literature, pripravu i mjerenje uzoraka te analizu i interpretaciju rezultata. Po završetku eksperimentalnog dijela istraživanja student je dužan prezentirati istraživanje u obliku pisanog seminarskog rada i usmenog priopćenja.

ISHODI UČENJA:

Samostalno provesti znanstveno istraživanje.

Pregledati znanstvenu literaturu iz odabrane problematike.

Koncipirati provedbu eksperimentalnog rada.

Pripraviti uzorke za analizu instrumentnim tehnikama i provesti odgovarajuća mjerenja.

Interpretirati rezultate.

Prezentirati istraživanje u obliku pisanog seminarskog rada i usmenog priopćenja.

Literatura

- Obavezna literatura:
 - 1. Znanstveni radovi iz područja instrumentne analitike.
- Preporučena literatura:
 - 2. Suvremeni udžbenici iz područja instrumentne analitike.

Viši praktikum anorganske kemije (44010)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 60(V)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Mirta Rubčić
 - prof. dr. sc. Željka Soldin
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Željka Soldin (V)
 - prof. dr. sc. Mirta Rubčić (V)
 - doc. dr. sc. Ivana Kekez (V)
 - doc. dr. sc. Edi Topić (V)

Opis predmeta

NASTAVNI SADRŽAJ:

Sinteza organskih spojeva (liganda), kompleksnih spojeva prijelaznih metala, soli i kokristala. Hidrotermalna sinteza. Mehanokemijska sinteza. Prekristalizacija pripremljenih spojeva. Identifikacija i karakterizacija pripremljenih spojeva: IR spektroskopija, termička analiza, difrakcija rentgenskog zračenja na polikristalnom uzorku, difrakcija rentgenskog zračenja na monokristalnom uzorku.

ISHODI KOLEGIJA:

Sigurno i uredno rabiti laboratorijski pribor i kemikalije.

Samostalno sastaviti aparaturu prema zadanim uputama poznavajući ulogu određenih dijelova aparature.

Samostalno izvesti eksperiment prema zadanim uputama.

Usporediti odabrane metode sinteza u anorganskoj kemiji.

Analizirati i kritički prosuditi mjerne podatke.

Povezati teorijska znanja s provedenim eksperimentom.

Predložiti metodu sinteze, karakterizacije i analize odgovarajućeg (anorganskog) spoja.

Predstaviti rezultate svog rada u obliku izvješća.

Samostalno koristiti stručnu literaturu i ostale relevantne izvore informacija što podrazumijeva dobro poznavanje engleskog kao jezika struke.

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- 1. G. S. Girolami, T. B. Rauchfuss, R. J. Angelici, Synthesis and Technique in Inorganic Chemistry, 3. izd, University Science Books Sausalito, 1999.

- **Preporučena literatura:**

- 2. Originalni znanstveni radovi
- 3. W. L. Jolly: The Synthesis and Characterization of Inorganic Compounds, Waveland Press 1991.
- 4. J. Tanaka, S. L. Suib: Experimental Methods in Inorganic Chemistry, Prentice Hall, 1998.

Viši praktikum biokemije (44023)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 60(V)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - doc. dr. sc. Marko Močibob
- Izvođači:
 - Petra Modrušan, mag. chem. (V)
 - doc. dr. sc. Marko Močibob (V)
 - dr. sc. Igor Živković (V)

Opis predmeta

NASTAVNI SADRŽAJI:

Umnožavanje fragmenata DNA koji nose gen za određeni protein pomoću PCR-reakcije. Izolacija plazmidne DNA, te razgradnja restriktivnim enzimima. Ugradnja umnoženog fragmenta u pripremljeni plazmidni vektor. Odabir rekombinantnih plazmida. Transformacija bakterijskog soja rekombinantnim plazmidom. Indukcija prekomjerne ekspresije proteina kodiranog umnoženim fragmentom DNA. Provjera prekomjerne ekspresije proteina SDS-gel elektroforezom. Izolacija ukupnih staničnih proteina iz induciranih bakterija. Pročišćavanje prekomjerno eksprimiranog proteina afinitetnom kromatografijom na Ni-NTA agaroznoj koloni. Provjera kromatografskih frakcija na SDS-poliakrilamidnom gelu. Spektrofotometrijsko određivanje koncentracije proteina. Bioinformatička analiza ciljnog gena i proteina.

ISHODI UČENJA:

1. samostalno provoditi složene i suvremene biokemijske i molekularno-biološke eksperimente koji uključuju tehnike rekombinantne DNA i metode manipulacije s proteinima
2. samostalno rukovati složenijim i suvremenim uređajima koji se koriste u biokemijskom laboratoriju
3. osmisлити postupak ugradnje gena u plazmidni vektor s ciljem dobivanja rekombinantnog fuzijskog proteina
4. izvesti eksperimente ugradnje gena u plazmidni vektor uz korištenje odgovarajućih kontrola, te provjeriti uspješnost ugradnje
5. transformirati bakterijske stanice rekombinantnim plazmidom
6. provesti prekomjernu ekspresiju rekombinantnog fuzijskog proteina u bakterijskom domaćinu
7. pročistiti prekomjerno eksprimiran protein afinitetnom kromatografijom
8. odrediti čistoću i koncentraciju pročišćenog proteina
9. kritički promišljati o izvedenim eksperimentima i predložiti poboljšanje i/ili optimizaciju eksperimentalnih uvjeta i postupaka
10. napisati detaljan izvještaj o radu u praktikumu u obliku znanstvenog članka

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- 1. OBAVEZNA LITERATURA:

Interna skripta za Viši praktikum biokemije (2. radno izd.), Zavod za biokemiju, PMF, Zagreb 2013.

pET System Manual (11. izd.), Novagen, 2005.

Relevantna poglavlja iz knjige R. R. Burgess, M. P. Deutscher (ur.), *Methods in Enzymology: Guide to Protein Purification* (2. izd.), Elsevier, 2009.

Odabrani izvorni i revijalni znanstveni radovi

- **Preporučena literatura:**

- 2. DOPUNSKA LITERATURA:

A. Ambriović Ristov (gl. ur.), *Metode u molekularnoj biologiji*, Institut Ruder Bošković, Zagreb, 2007.

J. Sambrook i D. W. Russell, *Molecular Cloning: a laboratory manual* (3. izd.) Cold Spring Harbor Laboratory Press, 2001.

S. B. Primrose i R. M. Twyman, *Principles of Gene Manipulation and Genomics* (7. izd.), Blackwell Publishing, 2006.

L. Stryer, J. Berg i J. Tymoczko, *Biokemija* (6. izd.), Školska knjiga, 2013. (prijevod na hrvatski jezik)

J. M. Berg, J. L. Tymoczko i L. Stryer, *Biochemistry* (7. izd.), W. H. Freeman & Co, New York, 2012.

D. L. Nelson i M. M. Cox, *Lehninger Principles Of Biochemistry* (6. izd.), W. H. Freeman & Co, New York, 2013.

Viši praktikum fizikalne kemije 1 (44042)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 60(V)
- Obavezni/izborni: obavezni
- Semestar: 1

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Vladislav Tomišić
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Tomica Hrenar (V)
 - Matija Modrušan, mag. chem. (V)
 - Tea Juračić, univ. mag. chem. (V)
 - dr. sc. Andrea Usenik (V)
 - Ivor Vavra Plavšić, univ. mag. chem. (V)
 - prof. dr. sc. Gordan Horvat (V)
 - prof. dr. sc. Josip Požar (V)
 - prof. dr. sc. Vladislav Tomišić (V)
 - dr. sc. Jasmina Jukić (V)
 - prof. dr. sc. Davor Kovačević (V)
 - dr. sc. Tin Klačić (V)
 - dr. sc. Katarina Leko (V)
 - Marin Liović, mag. chem. (V)
 - izv. prof. dr. sc. Nikola Bregović (V)
 - prof. dr. sc. Tajana Begović (V)

Opis predmeta

Viši praktikum fizikalne kemije 1 organiziran je tako da student izabere neku od vježbi iz područja fizikalne kemije ponuđenih na početku semestra te da tu vježbu, uz mentorstvom jednog asistenta, izvede samostalno od početka do kraja. Navedeno uključuje pregled literature, upoznavanje s nekom od eksperimentalnih metoda koja će se koristiti u vježbi (npr. konduktometrija, potencijometrija, UV-Vis spektrofotometrija), pripremu otopina, izvedbu eksperimenta, obradu podataka i pisanje izvješaja.

ISHODI:

1. Uz pomoć iskusnijeg znanstvenika isplanirati istraživanje manjeg opsega.
2. Pregledati literaturu vezanu uz temu predviđenog istraživanja.

3. Provesti predviđena eksperimentalna/računalna istraživanja uz pomoć iskusnijeg znanstvenika.
4. Napisati izvještaj u obliku koji odgovara znanstvenom radu.
5. Prezentirati rezultate istraživanja putem kratkog usmenog priopćenja.

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- 3. T. Cvitaš, N. Kallay: Fizičke veličine i jedinice međunarodnog sustava, Školska knjiga, Zagreb, 1980.

- **Preporučena literatura:**

- 1. 1. P. W. Atkins, J. de Paula: Atkins' Physical Chemistry, 7. izdanje, Oxford Univ. Press, Oxford, 2002. 2. R. J. Silbey, R. A. Alberty: Physical Chemistry, 3. izdanje, Wiley, New York, 2001. 3. P. W. Atkins, M. J. Clugston, Načela fizikalne kemije, Školska knjiga, Zagreb, 1989. 4. T. Cvitaš, N. Kallay: Fizičke veličine i jedinice Međunarodnog sustava, Školska knjiga, Zagreb, 1980.
- 2. R. J. Silbey, R. A. Alberty: Physical Chemistry, 3. izd., Wiley, New York, 2001.

Viši praktikum fizikalne kemije 2 (44049)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 60(V)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Vladislav Tomišić
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Tomica Hrenar (V)
 - Matija Modrušan, mag. chem. (V)
 - Tea Juračić, univ. mag. chem. (V)
 - dr. sc. Andrea Usenik (V)
 - Ivor Vavra Plavšić, univ. mag. chem. (V)
 - prof. dr. sc. Gordan Horvat (V)
 - prof. dr. sc. Vladislav Tomišić (V)
 - prof. dr. sc. Davor Kovačević (V)
 - dr. sc. Jasmina Jukić (V)
 - dr. sc. Tin Klačić (V)
 - dr. sc. Katarina Leko (V)
 - prof. dr. sc. Branimir Bertoša (V)
 - Matej Kožić, univ. mag. chem. (V)
 - izv. prof. dr. sc. Nikola Bregović (V)
 - prof. dr. sc. Tajana Begović (V)

Opis predmeta

Viši praktikum fizikalne kemije 2 ima zadatak uvođenja studenata u znanstveni rad. Organiziran je tako da student izabere neku od vježbi iz područja fizikalne kemije ponuđenih na početku semestra te da tu vježbu, uz mentorstvom jednog asistenta, izvede samostalno od početka do kraja. Navedeno uključuje pregled literature, upoznavanje s nekom od eksperimentalnih metoda koja će se koristiti u vježbi (npr. konduktometrija, potenciometrija, UV-Vis spektrofotometrija), pripremu otopina, izvedbu eksperimenta, obradu podataka i pisanje izvještaja.

Literatura

- **Obavezna literatura:**

- 1. 1. P. W. Atkins, J. de Paula: Atkins' Physical Chemistry, 7. izdanje, Oxford Univ. Press, Oxford, 2002. 2. R. J. Silbey, R. A. Alberty: Physical Chemistry, 3. izdanje, Wiley, New York, 2001. 3. P. W. Atkins, M. J. Clugston, Načela fizikalne kemije, Školska knjiga, Zagreb, 1989. 4. T. Cvitaš, N. Kallay: Fizičke veličine i jedinice Međunarodnog sustava, Školska knjiga, Zagreb, 1980.

Viši praktikum organske kemije (44053)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 60(V)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Vesna Petrović Peroković
 - prof. dr. sc. Ivana Biljan
- Izvođači:
 - izv. prof. dr. sc. Đani Škalamera (V)
 - prof. dr. sc. Vesna Petrović Peroković (V)
 - doc. dr. sc. Željka Car (V)
 - prof. dr. sc. Ivana Biljan (V)
 - Filip Kučas, univ. mag. chem. (V)

Opis predmeta

NASTAVNI SADRŽAJI:

Pretraživanje baza podataka i citiranje literature; Mannichova reakcija; Oksidativno fenolno povezivanje; Priprava kvaternih amonijevih soli; Kemijska rezolucija enantiomera i kiralna HPLC analiza; Perkinova kondenzacija; Knoevenagelova reakcija (mikrovalna sinteza); Enzimski katalizirana enantioselektivna redukcija (biokataliza; polarimetrija); Molekulska modeliranje.

ISHODI UČENJA:

Samostalno koristiti laboratorijsko suđe, sastavljati aparature i provoditi klasične i napredne postupke vezane uz rad u organskom laboratoriju.

Koristiti tekućinsku kromatografiju visoke djelotvornosti (HPLC) za analizu smjesa i određivanje optičke čistoće.

Samostalno identificirati produkte reakcija na temelju IR i NMR spektara.

Navesti i objasniti moderne postupke organske sinteze.

Provesti konformacijsku analizu primjenom računalne kemije.

Samostalno planirati višestupanjsku sintezu organskih spojeva.

Samostalno koristiti znanstvenu i stručnu literaturu te ostale relevantne izvore informacija.

Literatura

- Obavezna literatura:

- 1. 1. Interna skripta
- 2. A. I. Vogel: A Text-book of Practical Organic Chemistry, 5. izdanje, Longman, London, 1989.
- 3. R. M. Silverstein, G. C. Bassler, T. C. Morrill, Spectrometric Identification of Organic Compounds, 5. izdanje, John Wiley & Sons, New York, 1991.

• **Preporučena literatura:**

- 2. J. Clayden, N. Greeves, S. Warren and P. Wothers, Organic Chemistry, Oxford Press, 2001.
- 3. J. A. Moore, D. L. Dalrymple, Experimental Methods in Organic Chemistry, W.B. Saunders Comp., 1976.
- 4. S. H. Pine, Organska kemija, Školska knjiga, Zagreb, 1994.
- 5. J. March, Advanced Organic Chemistry, John Wiley & Sons, New York, 2001.
- 6. J. Mann, R. S. Davidson, J. B. Hobbs, D. V. Banthorpe and J. B. Harborne, Natural Products, Longman Ltd., UK, 1994.
- 7. A. R. Leach, Molecular Modelling, Principles and Applications, 2nd Ed., Longman, 2001.
- 8. C. J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry, Wiley, 2002.

Kompleksni spojevi prijelaznih metala u katalizi (kolegij izvođen na engleskom jeziku) (199217)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 2, 4

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - izv. prof. dr. sc. Jana Pisk
- Izvođači:
 - izv. prof. dr. sc. Jana Pisk (P)

Opis predmeta

NEMA PODATAKA

Literatura

- Obavezna literatura:
 - I. Chorkendorff, J. W. Niemantsverdriet (2003): Concepts of Modern Catalysis and Kinetics
- Preporučena literatura:
 - R. A. Sheldon, I. W. C. E. Arends (2007): Chemistry and Catalysis

Ishodi učenja

1. Design a catalytic reaction to obtain the desired product
2. Adjust the catalytic process following the principles of green chemistry.
3. Korelirati primjenu molekulskih i heterogenih katalizatora za pojedine katalitičke reakcije.
4. Choose methods for proving the resulting reaction intermediates, i.e. monitoring the catalytic cycle.
5. Connect current research in the field of catalysis with the concepts presented in the course.

Kristalokemija (kolegij izvođen na engleskom jeziku) (172954)

Osnovni podaci

- ECTS bodovi: 5.0
- Sati nastave: 30(P) + 15(S)
- Obavezni/izborni: izborni
- Semestar: 1, 3

Nositelji i izvođači

- Nositelji:
 - prof. dr. sc. Marijana Đaković
- Izvođači:
 - prof. dr. sc. Marijana Đaković (P)

Opis predmeta

COURSE CONTENT:

1. Properties of crystals (nucleation, growth, habit, color, hardness). 2. Miller index; point groups, symmetry elements, proper and improper axes. 3. Symmetry elements with translation: helical axes, glide planes; Bravais lattices; space groups (symbols of space groups). 4. Space groups (in detail). 5. Basics of X-ray diffraction (Bragg's law, symmetry of diffraction image, systematic absences of reflections). 6. X-ray data collection. 7. Methods for solving crystal structures (Patterson and direct methods) 8. Refining structures. 9. Structure of metals and alloys; close packing 10. Phase diagrams 11. Ionic bonding and structures. 12. Molecular crystals (interatomic interactions). Structure-property relationship throughout the lectures.

SEMINAR:

Finding an appropriate crystal for X-ray data collection, data collection, structure solution and refinement; interpretation of the structure. Written short report.

Literatura

- Preporučena literatura:
 - A. R. West (1998): Solid State Chemistry and its Applications
 - 2. C. Giacovazzo, H. L. Monaco, G. Artioli, D. Viterbo, G. Ferraris, G. Gilli, G. Zanotti, M. Catti (2002): Fundamentals of Crystallography

Ishodi učenja

1. To define symmetry operations, Bravais lattices, crystal systems, point and space groups.
2. To list the main types of crystal structures of metals and alloys

3. To describe phase diagrams. To calculate the fraction and composition of components from a binary phase diagram.
4. To describe the characteristics of ionic interactions and structures.
5. To explain interactions in molecular structures.
6. To explain the basics of X-ray diffraction.
7. To describe the general methods for crystal structure determination.
8. To solve a structure.