

Прилог бр. 3		Предметна програма од прв циклус на студии			
1.	Наслов на наставниот предмет	Компјутерски дизајн на органски соединенија			
2.	Код				
3.	Студиска програма	Полимерни материјали (ПМ)			
4.	Организатор на студиската програма (единица, односно институт, катедра, оддел)	Технолошко-металуршки факултет Институт за органски технологии			
5.	Степен (прв, втор, трет циклус)	прв			
6.	Академска година/семестар	4 година 7 семестар	7.	Број на ЕКТС кредити	5
8.	Наставник	д-р Весна Димова, ред. проф			
9.	Предуслови за запишување на предметот	Органска хемија (п)			
10.	Цели на предметната програма (компетенции): Цел на предметот е студентите да се оспособат за користење на соодветен софтверски пакет за дизајнирање на органски молекули, нивна оптимизација, определување на нивните молекуларни својства и предвидување на нивното однесување и реакциона способност.				
11.	Содржина на предметната програма: Вовед во компјутерскиот дизајн преку користење на софтверскиот пакет HyperChem, како повеќенаменски програмски пакет кој дава повеќе можности за дизајн на органски соединенија. Запознавање со структурата и можностите на софтверскиот пакет. Цртање и прикажување на молекулите со геометрија пропорционална на геометријата во гасна фаза. HyperChem пресметки: молекуларно механички (MM ⁺ , AMBER, BIO+, OPLS); семи-емпириски (MNDO, CNDO; INDO; AM1; PM3, ZNDO и др.), ab-initio-метод (STO-3G, 3-21G, 6-31G*, 6-31G**). Геометриска оптимизација и наоѓање на преодна состојба; одредување на: должина на врски, агли, вкупна енергија, топлина на формирање, енталпија, ентропија, диполен момент, полнежи и др. Молекуларна динамика: примери за симулација на молекуларна динамика. Проучување на реактивноста на молекулата: одредување на реакционен центар; најстабилен облик на молекулата; протонски афинитет; пресметување на теоретски рК константи и др. Предвидување на: UV, IR и NMR спектри. Примена на HyperChem програмот за испитување на мономери и линеарни полимери.				
12.	Методи на учење: предавања и вежби, консултации, проектна (домашна, семинарска) задача, домашно учење (подготовка на испит)				
13.	Вкупен расположив фонд на време	150 часови			
14.	Распределба на расположивото време				
15.	Форми на наставните активности	15.1	Предавања-теоретска настава	30 часови	
		15.2	Вежби (лабораториски, аудиториски), семинари, тимска работа	30 часови	
16.	Други форми на активности	16.1	Проектни задачи	30 часови	
		16.2	Самостојни задачи	30 часови	
		16.3	Домашно учење	30 часови	
17.	Начин на оценување				
	17.1.	Тестови	80 бодови		
	17.2.	Успешно реализирани лабораториски/аудиториски вежби	10 бодови		
	17.3.	Активност и учество	5 бодови		

	17.4.	Домашна задача и/или семинарска работа			5 бодови	
18.	Критериуми за оценување (бодови/оценка)			до 50 бода	5 (пет) (F)	
				од 51 до 60 бода	6 (шест) (E)	
				од 61 до 70 бода	7 (седум) (D)	
				од 71 до 80 бода	8 (осум) (C)	
				од 81 до 90 бода	9 (девет) (B)	
				од 91 до 100 бода	10 (десет) (A)	
19.	Услови за потпис и полагање на завршен испит			Минимум 11 бодови од активностите 17.1 до 17.4.		
20.	Јазик на кој се изведува наставата			Македонски		
21.	Метод на следење на квалитетот на наставата			Анонимна анкета на студентите		
22.	Литература					
	Задолжителна литература					
	22.1	Ред.број	Автор	Наслов	Издавач	Година
		1.		HyperChem [®] Computational Chemistry Theory and methods	Hypercube, Inc	1996
		2.		HyperChem [®] Computational Chemistry Practical Guide	Hypercube, Inc	1996
		3.	D. C. Young	Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real- World Problems	John Wiley & Sons, Inc.	2001
	22.2	Дополнителна литература				
		Ред.број	Автор	Наслов	Издавач	Година
		1.	K. I. Ramachandran G. Deepa K. Namboori	Computational Chemistry and Molecular Modeling Principles and Applications	Springer	2008
		2.	A. Hinchliffe	Molecular Modelling for Beginners	John Wiley & Sons Ltd	2003
	3.		An introduction to Computational Biochemistry	Wiley-Liss, Inc., New York.	2002	