

Прилог бр.3		Предметна програма од втор циклус на студии			
1.	Наслов на наставниот предмет	<b>Анализа и компјутерско моделирање на органски и биополимерни молекули</b>			
2.	Код	<b>НМП02И13</b>			
3.	Студиска програма	<b>Нови материјали –полимери</b>			
4.	Организатор на студиската програма (единица, односно институт, катедра, оддел)	<b>Институт за органска технологија Технолошко-металуршки факултет</b>			
5.	Степен (прв, втор, трет циклус)	Втор			
6.	Академска година / семестар	9	7.	Број на ЕКТС кредити	6
8.	Наставник	<b>Проф. д-р Весна Димова</b>			
9.	Предуслови за запишување на предметот				
10.	Цели на предметната програма (компетенции):  Стекнување на знаења за дизајн и оптимизацијата на органски и биополимерни молекули и примена на QSAR/QSPR методи.				
11.	Содржина на предметната програма:  Вовед во компјутерскиот дизајн: користење на софтверски пакет HyperChem, за дизајн на органски и биополимерни молекули. Запознавање со структурата и можностите на софтверскиот пакет. Цртање и прикажување на молекули. Молекуларно механички, семи-емпириски, ab-initio и други методи. Геометриска оптимизација и одредување на: должина на врски, агли, вкупна енергија, топлина на формирање, енталпија, ентропија, диполен момент, полнежки и др. Молекуларна динамика: примери за симулација на молекуларна динамика. Примена на HyperChem програмот за испитување на мономери и линеарни полимери.  Поим, видови и начин на добивање на дескриптори: физичко-хемиски, тополошки, геометриски, електронски, квантно-механички и други.  QSAR/QSPR (Quantitative structure–activity/property relationship) методи за дефинирање на квантитативниот однос на структурата на биополимерите и нивната активност/особини.  Примена на хемометрија во анализа на добиените QSAR/QSPR модели.				
12.	Методи на учење:				
13.	Вкупен расположив фонд на време				
14.	Распределба на расположивото време	180 часа			
15.	Форми на наставните активности	15.1.	Предавања- теоретска настава		30 часа
		15.2.	Вежби (лабораториски, аудиториски), семинари, тимска работа		40 часа
16.	Други форми на активности	16.1.	Проектни задачи		40 часа
		16.2.	Самостојни задачи		40 часа
		16.3.	Домашно учење		30 часа
17.	Начин на оценување				
	17.1.	Тестови		50 бодови	

	17.2.	Семинарска работа/ проект (презентација: писмена и усна)		35 бодови					
	17.3.	Активност и учество		15 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.	Услов за потпис и полагање на завршен испит	Минимум 11 бодови од 17.2 и 17.3							
20.	Јазик на кој се изведува наставата	Македонски							
21.	Метод на следење на квалитетот на наставата	Анонимна анкета							
22.	<b>Литература</b>								
	<b>Задолжителна литература</b>								
	22.1	Ред.број	Автор	Наслов	Издавач				
		1.	T. Puzyn, J. Leszczynski, M. T.D. Cronin J. Moores	Recent Advances in QSAR Studies Methods and Applications	Springer				
		2.	K. Varmuza	Chemometrics in Practical applications	InTech Rijeka, Croatia				
		3.	F. T. Chau, Y. Z. Liang, J.Gao, X.G.Shao	Chemometrics From Basics to Wavelet Transform	John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey				
		4.	C. E. Carraher Jr.	Seymour/Carraher's Polymer Chemistry, Sixth Edition, Revised and Expanded	Marcel Dekker, INC. New York • Basel				
	22.2	<b>Дополнителна литература</b>							
		Ред.број	Автор	Наслов	Издавач				
		1.	R. Gancarz	Mathematical methods In drug design	Wroclaw University of Technology Wroclaw				