

Прилог бр.3.47		Предметна програма од прв циклус на студии			
1.	Наслов на наставниот предмет	<b>КОМПЈУТЕРСКИ ДИЗАЈН НА ОРГАНСКИ СОЕДИНЕНИЈА</b>			
2.	Код	ПМ8И41			
3.	Студиска програма	Технолошко-металуршки факултет Полимерни материјали			
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	<b>4 година</b> <b>7 семестар</b>	7.	Број на ЕКТС- кредити	<b>4</b>
8.	Наставник	Проф. д-р Весна Димова			
9.	Предуслови за запишување на предметот	Органска хемија (в)			
10.	Цели на предметната програма (компетенции): Оспособување на студентите за користење на софтверски пакети за дизајнирање на органски молекули, геометриска оптимизација на органски, биооргански и полимерни молекули, определување на молекуларни својства и предвидување на нивното однесување и реакциона способност.				
11.	Содржина на предметната програма: Вовед во компјутерскиот дизајн на органски молекули. Видови на софтверски пакети. Детално запознавање со структурата и можностите на софтверскиот пакет HyperChem. Цртање и прикажување на молекули со геометрија пропорционална на геометријата во гасна фаза. HyperChem пресметки: молекуларно механички; семи-емпирички и ab-initio-методи. 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. Предвидување на: UV, IR и NMR спектри со помош на софтверскиот пакет HyperChem.				
12.	Методи на учење: предавања и консултации, вежби, проект, домашно учење (подготовка на испит)				
13.	Вкупен расположив фонд на време	120 часови			
14.	Распределба на расположивото време				
15.	Форми на наставните активности	15.1.	Предавања- теоретска настава	30 часови	
		15.2.	Вежби, семинари, тимска работа	30 часови	
16.	Други форми на активности	16.1.	Проектни задачи	30 часови	
		16.2.	Домашно учење – задачи	30 часови	
17.	Начин на оценување				
	17.1.	Тестови	30		
	17.2.	Индивидуална работа/проект ( презентација: писмена и усна)	50		
	17.3.	Активност и учество	20		
18.	Критериуми за оценување (бодови/ оценка)	до 50 бода	5 (пет) (F)		
		51 x до 60 бода	6 (шест) (E)		
		61 x 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 за полагање завршен испит	Минимум 51 бодови од активностите 17.2 до 17.3.				
20.	Јазик на кој се изведува наставата	Македонски				
21.	Метод на следење на квалитетот на наставата	Анонимна анкета на студентите				
22.	Литература					
	22.1.	Задолжителна литература				
		Реден број	Автор	Наслов	Издавач	Година
		1.		HyperChem® Computational Chemistry Theory and methods	Hypercube, Inc	1996
		2.		HyperChem® Computational Chemistry	Hypercube, Inc	1996
				Practical Guide		
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					
	Реден број	Автор	Наслов	Издавач	Година	
	1.	K. I. Ramachandran G. Deepa K. Namboori	Computational Chemistry and Molecular Modeling Principles and Applications	Springer	2008	
	2.	C. Stan Tsai	An introduction to Computational Biochemistry	Wiley-Liss, Inc.	2002	
	3.	A. Hinchliffe	Molecular Modelling for Beginners	Wiley	2003	