DIZAJN NOVIH LIJEKOVA - MOLEKULARNO MODELIRANJE	
OPĆE INFORMACIJE	
Nositelj predmeta	Doc. dr. sc. Hrvoje Brkić
Suradnici	Prof. dr. sc. Dario Faj
Studij	Sveučilišni intergrirani prijediplomski i diplomski studij Farmacija
Status predmeta	Obvezan
Godina studija, semestar	4. godina, 8. semestar
Bodovna vrijednost (ECTS)	**2,0 ECTS**
Način izvođenja nastave (broj sati)	Predavanje: 15; Seminari: -; Vježbe 15
Očekivani broj studenata na predmetu	30-35

OPIS PREDMETA

Ciljevi predmeta

Cilj predmeta je pružiti studentima uvod u osnove molekulskog modeliranja i korištenje molekulskog modeliranja u biotehnologiji. Osim toga studenti će razumjeti biofizikalne principe koji se koriste pri molekulskom modeliranju, i na taj način podići razinu znanja o molekulskom modeliranju iznad običnog korištenja alata. Cilj kolegija je i studentima pružiti dovoljnu količinu teorijskog znanja, koju će moći koristiti pri odabiru metode molekulskog modeliranja u razvoju novih bioaktivnih molekula.

Uvjeti za upis predmeta i ulazne kompetencije koje su potrebne za predmet

Položen kolegij Bioinformatika i biostatistika.

Ishodi učenja na razini programa kojima predmet pridonosi

1.1., 2.1, 2.3., 3.4.,3.5., 4.2.

Očekivani ishodi učenja na razini predmeta

Nakon odslušanih predavanja, odrađenih seminara i vježbi, samostalnog učenja i položenog ispita studenti će moći:

1. Razlučiti kako se kvanto-mehanički računi koriste za opis kemijskih reakcija.
2. Prezentirati koje aproksimacije koriste semiempirijski računi, i za što se najčešće koriste.
3. Rangirati metode molekulske mehanike i molekulske dinamike, i znati u kojim se situacijama one mogu primjenjivati.
4. Obrazložiti koje se aproksimacije koriste pri molekulskom modeliranju i koje su prednosti i nedostatci pojedinih aproksimacija.
5. Koristiti softverske pakete i parametrizirati sustav u polju sila.
6. Provesti jednostavnu analizu proteinske simulacije.
7. Grafički prikazati rezultate molekulske dinamike i dobivene molekulske strukture.

Sadržaj predmeta

Predavanja: Korisni koncepti molekulskog modeliranja. Koordinatni sustavi, plohe potencijalne energije, računalni hardver i softver primjenjiv u modeliranju. Matematički koncepti
Uvod u računalnu kvantnu mehaniku. Jednoelektronski atomi, višeelektronski atomi i molekule. Bazni skupovi, ab initio računi. Empirijska polja sila. Molekulska mehanika. Opća svojstva molekulske mehanike, produljenje veza, savijanje kutova, elektrostatske interakcije, van der Waalsove interakcije, ne vezne interakcije, vodikove veze u molekulskoj mehanici, polja sila.
Konformacijske promjene. Monte Carlo simulacijske metode.
Vježbe:
Energijska minimizacija i srodne metode za istraživanje plohe slobodne energije. Minimizacija prvog stupnja, konjugirani gradijenti (conjugate gradient), metoda najstrmijih koraka (steepest descent). Računalne metode simulacije. Fazni prostor, izračun jednostavnih termodinamičkih parametara, rubni uvjeti. Osnove statističke mehanike. Simulacije molekulske dinamike. Topologije, simulacije jednostavnim metodama, ograničenja u molekulskoj dinamici.. Statističke provjere i redukcija varijance.

Obrada i prikaz rezultata. Grafički prikaz vremenski ovisnih parametara, trodimenzionalni prokaz struktura i kemijskih interakcija tijekom vremena.

Vrste izvođenja nastave

Predavanja; vježbe

Obaveze studenata

Pohađanje svih oblika nastave je obavezno, a student mora pristupiti svim provjerama znanja. Student može opravdano izostati s 30% (svakog od oblika nastave. Neodrađena vježba mora se kolokvirati.

Praćenje rada studenata *(Povezivanost ishoda učenja, nastavnih metoda i ocjenjivanja)*

Nastavna aktivnost	ECTS	Ishod učenja	Aktivnost studenta	Metode procjenjivanja	Ocjenski bodovi	
					Min.	Max.
Pohađanje nastave	0,2	1-7	Prisutnost na nastavi	Evidencija	1	5
Seminarski rad	1,3	4,6,7	Seminarski rad	Izrada malog projekta (seminarskog zadatka)	29	45
Završni ispit	0,5	1-7	Učenje za završni ispit	Pismen i ispit	30	50
Ukupno	**2,0**				**0**	**100**

Vrednovanje pisanog dijela završnog ispita

Postotak točno riješenih zadataka (%)	Ocjenski bodovi
>95,00	50
90,00-94,99	47
85,00-89,99	45
80,00-84,99	40
75,00-79,99	38
70,00-74,99	35
65,00-69,99	33
60,00-64,99	30

Oblikovanje završne ocjene:

Ocjenskim bodovima ostvarenim tijekom nastave pridružuju se bodovi ostvareni na završnom ispitu. Ocjenjivanje se vrši apsolutnom raspodjelom, odnosno na temelju konačnog postignuća i uspoređuje se s brojčanim sustavom na sljedeći način: A – izvrstan (5): 90-100 ocjenskih bodova ; B – vrlo dobar (4): 80-89,99 ocjenskih bodova; C – dobar (3): 65-79,99 ocjenskih bodova; D – dovoljan (2): 50-64,99 ocjenskih bodova

Obavezna literatura (dostupna u knjižnici i putem ostalih medija)

Naslov	Broj primjeraka u knjižnici	Dostupnost preko ostalih medija
Andrew R. Leach Molecular Modelling Principles and applications (2nd Ed.) Pearson Education Limited 2001	1	

Dopunska literatura

Cullity and Stock:Elements of X-ray diffraction (3rd Ed.) Pretience and hall 2001.

Načini praćenja kvalitete koji osiguravaju stjecanje izlaznih kompetencija

Anonimna, kvantitativna, standardizirana studentska anketa o predmetu i radu nastavnika koju

provode Uredi za kvalitetu Medicinskog fakulteta Osijek i/ili Prehrambeno-tehnološkog fakulteta Osijek.
Napomena
E-učenje ne ulazi u norma sate predmeta, ali se koristi u nastavi i sadrži poveznice na različite stranice, video i audio materijale dostupne na mrežnim stranicama.