|  |  |
| --- | --- |
| **Šifra predmeta:** | **2204** |
| **Naziv predmeta:** | **MODELIRANJE BIOLOŠKI VAŽNIH MOLEKULA I NJIHOVIH KOMPLEKSA** |
| **OPĆI PODACI:** |
| **Studijski program:** | **Molekularne bioznanosti** |
| **Modul:** | Bioinformatika |
| **Nositelj predmeta:** | Prof.dr. sc. Sanja Tomić, znanstvena savjetnica – trajno zvanje |
| **Ustanova nositelja predmeta:** | Instituta Ruđer Bošković |
| **Suradnici – izvoditelji:** | Branimir Bertoša |
| **Status predmeta:** | □ obvezni X □ izborni |
| **Godina i semestar u kojem se predmet predaje:** | I. godina, II. semestar |
| **Cilj predmeta:** |  |
| Razumijevanje metoda i tehnika koje se koriste u modeliranju molekula i njihovih kompleksa.Mogućnost procjene značaja molekulskog modeliranja za rješavanje konkretnih problema u bioznanostima, te kao pomoć u planiranju i izvođenju eksperimenata.Stjecanje praktičnog znanja u korištenju nekih od programa za molekulsko modeliranje, te uinterpretaciji rezultata molekulskog modeliranja. |
| **Sadržaj predmeta:** |  |
| Razvojem računala i računalnih programa, te padom njihove cijene, molekulsko modeliranje našlo je svoju široku primjenu u gotovo svim bioznanostima. Ta relativno nova znanstvena disciplina naglo se razvila u posljednjem desetljeću i postala popularna među biofizičarima, biokemičarima, biolozima i medicinarima. Tijekom kolegija studenti će se upoznati s osnovnim pretpostavkama i metodama molekulskog modeliranja. Počevši s upoznavanjem baza podataka koje koristimo u modeliranju biomakromolekula, preko uvida u tehnike modeliranja i polja sila koja se koriste u modeliranju biomakromolekula i njihovih kompleksa, polaznici će naučiti kako dizajnirati virtualni *(in silico*) eksperiment koji će im služiti kao predožak stvarnom. Teme predavanja prilagoditi će se znanju i potrebama studenata, a svakako će obuhvatiti: dizajn mutanata proteina, gradnju kompleksa proteina i nukleinskih kiselina s malim molekulama, te samih makro.molekula, pronalaženje aktivnog mjesta i smještanje supstrata u to mjesto, parametrizaciju i optimizaciju struktura (sustava), moguće promjene oblika (receptora, liganda, kompleksa) koje nastaju tijekom vezanja i kako ih modelirati.Polaznici će se upoznati s osnovnim obilježjima kvantnomehaničkih i empirijskih metoda i njihovim značajem u modeliranju bioloških molekula i procesa. Naučiti će kako korištenjem hibridnih qvantno mehaničkih i iempiriskih metoda (QM/MM i QM/MD) modelirati enzimatske reakcije na realnim sustavima (bez korištenja aproksimativnih, malih modela). Kroz pregled praktičnih pristupa problemima obraditi će se metode molekulske mehanike i dinamike, Monte Carlo, te analiza normalnih modova. Objasniti će se značaj otapala i periodičnosti kod bioloških molekula, te procjena rotacijske/konformacijske entropije. Na konkretnim primjerima studenti će se upoznati s tehnikama koje se koriste u iznalaženje kvantitativnog odnosa o strukturi ovisnih veličina s biološkom aktivnošću.Posebna pozornost posvetiti će se interpretaciji modela, tj kako iz dobivenih rezultata modeliranja povući relevantne zaključke i na temelju njih postaviti (odnosno objasniti) stvarni eksperiment. |
| **Ishodi učenja: kompetencije, znanje, vještine koje predmet razvija** |  |
| Nakon odslušanog kolegija student će:- znati navesti i objasniti metode molekulskog modeliranja, razumjeti će kratice koje se učestalo koriste u znanstvenim radovima, a vezanie su za molekulsko modeliranje (MD, QM, QM/MM, QSAR, PCA, NM, SAS...)- znati objasniti pojam polja sila i nabrojiti polja sila koja se najčešće koriste u modeliranju bioloških makromolekula kao i osnovne karakteristike tih polja sila.- razumjeti važnosti otapala u molekulskom modeliranju- znati navesti karakteristike i objasniti razlike između različitih hibridnih kvantno-mehaničkih – molekulsko mehaničkih metoda- baratati osnovnim pojmovima iz osnova termodinamike i statističke fizike. |
| **Satnica, način izvedbe i ECTS koeficijent opterećenja studenta** |
| **ECTS bodovi** | 6 |
| **Broj sati**  | Predavanja |  5 |
| Seminari |  5 |
| Vježbe € | 20 |
| **Ukupno** | **30** |
| **NAČIN IZVOĐENJA NASTAVE I USVAJANJA ZNANJA** |
| Predavanja | Seminari | Vježbe | Radionice | Samostalni zadaci |
| **Multimedija i internet** | **Obrazovanje na daljinu** | **Konzultacije** | Rad u laboratoriju | **Mentorski rad** | Terenska nastava |
| **Napomene:**Provoditi ćemo provjeru sposobnosti korištenja postojećih programa za molekulsko modeliranje. |
| **Obveze studenata:**redovito pohađanje nastave uz mogući opravdani izostanak do 5 sati nastave i 3 sata vježbi |
| **Praćenje i ocjenjivanje studenata (označiti masnim tiskom samo relevantne kategorije)** |
| **Pohađanje nastave** | **Aktivnosti u nastavi** | **Obvezan seminarski rad** | **Vježba ili case study** |
| **Način ocjenjivanja:** |
| Pismeni ispit | **Usmeni ispit** | **Esej/Seminar** | Prikaz slučaja | Analiza objavljene publikacije |
| Projekt | **Kontinuirana provjera znanja u tijeku nastave** | Prezentacija | Praktičan rad |
| **Obvezna literatura:** |  |
| Essentials of Computational Chemistry, C.J. Cramer, John Wiley & Sons Ltd, The Atrium, Southern Gate, Chichester,West Sussex PO19 8SQ, England, 2004 |
| **Dopunska (preporučena) literatura:** |  |
| Computational structural biology : T. Schwede, Torsten, World Scientific, 2008Molecular modelling of Proteins, A. Kukol, Humana Press, 2008. |
| **Način praćenja kvalitete i uspješnosti izvedbe (evaluacija):** |  |
| Upitnici prije i nakon održane nastave, razgovor sa studentima i kolegama o mogućim novim temama i o opširnosti pristupa različitim nastavnim jedinicama.Uspješnost kolegija će evaluirati svake godine zajedničko stručno povjerenstvo Instituta Ruđer Bošković, Sveučilišta u Dubrovniku i Sveučilišta u Osijeku |