|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **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 u  interpretaciji 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, 2008  Molecular 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 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |