|  |  |
| --- | --- |
| **Šifra predmeta:** | **2205** |
| **Naziv predmeta:** | **STRUKTURNA BIOINFORMATIKA PROTEINA I BIOAKTIVNIH MOLEKULA** |
| **OPĆI PODACI:** |
| **Studijski program:** | **Molekularne bioznanosti** |
| **Modul:** | Bioinformatika |
| **Nositelj predmeta:** | Doc.dr. sc. Bono Lučić, viši znanstveni suradnik |
| **Ustanova nositelja predmeta:** | Institut Ruđer Bošković |
| **Suradnici – izvoditelji:** |  |
| **Status predmeta:** | □ obvezni X [x]  izborni |
| **Godina i semestar u kojem se predmet predaje:** | I godina, 2. semestar |
| **Cilj predmeta:** |  |
| Upoznavanje s općim načelima modeliranja svojstava i aktivnosti proteina i bioaktivnih molekula. Usvajanje znanja potrebnoga za praćenje i kritičku analizu znanstvenih rezultata u tom području. Razumijevanje postupka modeliranja do razine samostalne provedbe modeliranja svojstva ili aktivnosti izabranoga skupa bioaktivnih molekula ili proteina. |
| **Sadržaj predmeta:** |  |
| Pregled metoda za modeliranje svojstava i stukture proteina i bioaktivnih molekula. Algoritmi za izbor modela. Izbor reprezentativnog skupa poteina i bioaktivnih molekula za analizu, i uključivanje sličnosti. Opisivanje strukturnih posebnosti skupa proteina i bioaktivnih molekula s pomoću molekularnih strukturnih deskriptora. Parametri kvalitete modela s obzirom na provedbu postupka učenja i provjeru točnosti predviđanja modela. Parametri točnosti modela u postupku prilagodbe, križne provjere, i vanjske provjere. Pregled točnosti postojećih metoda u predviđanju farmakoloških svojstava bioaktivnih molekula i svojstava i stukture proteina. Modeliranje sekundarne strukture, konstanti savijanja i razmotavanja proteina, stukturalne klase, udjela sekundarne strukture, položaja proteina u stanici, i drugih globalnih svojstava proteina. Modeliranje 3D strukture na temelju sličnosti. Modeliranje strukture i topologije membranskih proteina. Pregled baza podataka i poslužitelja za modeliranje u strukturnoj bioinformatici, i njihovo korištenje. Modeliranje fizikalno-kemijskih svojstava (topljivost, lipofilnost, transport, apsorpcija), biološke aktivnosti i toksičnosti bioaktivnih molekula. |
| **Ishodi učenja: kompetencije, znanje, vještine koje predmet razvija** |  |
| Student će usvojiti osnovna načela modeliranja svojstava i aktivnosti proteina i bioaktivnih molekula. Ovladat će metodologijom koja je potrebna za provedbu modeliranja skupa podataka koji će tijekom rada biti dobiven u laboratoriju, kao i podataka iz literature. Student će usvojiti znanja potrebna za kritičku prosudbu kvalitete i ograničenja teorijskih bioinformatičkih metoda i modela, te steći znanja potrebna za pronalaženje i uporabu najvažnijih metode dostupnih preko interneta (u obliku računalnih programa ili poslužitelja) koje će koristiti u svome radu. |
| **Satnica, način izvedbe i ECTS koeficijent opterećenja studenta** |
| **ECTS bodovi** | 6 |
| **Broj sati**  | Predavanja | 5 |
| Seminari | 5 |
| Vježbe (E) | 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:** |
| **Obveze studenata:** Redovito pohađanje nastave uz mogući opravdani izostanak do 3 sata nastave. Student je obvezan održati manji seminar temeljen na pregledu literature. Na koncu predavanja student treba provesti analizu odabranoga skupa proteina ili bioaktivnih molekula uz pomoć nositelja predmeta. |
| **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:** |  |
| 1. D. J. Livingstone: “*Data Analysis for Chemists – Application to QSAR and Chemical Product Design*” Oxford Univerity Press, UK, 1995.2. D. Juretić: “*Bioenergetika – rad membranskih proteina*” Informator. Zagreb, 1997. Najvažniji znanstveni i radovi iz područja stukturne bioinformatike i modeliranja svojstava proteina i bioaktivnih molekula:3. S. F. Altschul; W. [Gish](http://www.ncbi.nlm.nih.gov/entrez/query.fcgi?db=PubMed&cmd=Search&term=%22Gish+W%22%5BAuthor%5D); W. [Miller](http://www.ncbi.nlm.nih.gov/entrez/query.fcgi?db=PubMed&cmd=Search&term=%22Miller+W%22%5BAuthor%5D); E. W. [Myers](http://www.ncbi.nlm.nih.gov/entrez/query.fcgi?db=PubMed&cmd=Search&term=%22Myers+EW%22%5BAuthor%5D); D. J. [Lipman](http://www.ncbi.nlm.nih.gov/entrez/query.fcgi?db=PubMed&cmd=Search&term=%22Lipman+DJ%22%5BAuthor%5D), Basic local alignment search tool, *J. Mol. Biol*. 215 (1990) 403-410.4. J. Kyte; R. F. Doolittle, A simple method for displaying the hydropathic character of a protein. *J. Mol. Biol*. 157 (1982) 105-132.5. G. von Heijne, Membrane-protein structure prediction – hydrophobicity analysis and the positive-inside rule. *J. Mol. Biol. 225* (1992) 487-494.6. B. Rost; C. Sander, Prediction of protein secondary structure at better than 70-percent accuracy, *J. Mol. Biol.* 232 (1993) 584-599.7. A. R. Katritzky; V. S. Lobanov; M. Karelson, QSPR: The Correlation and quantitative prediction of chemical and physical properties from structure, *Chem. Soc. Rev.* 24 (1995) 279-287. |
| **Dopunska (preporučena) literatura:** |  |
| 1. 1. C. [Gibas](http://www.amazon.com/exec/obidos/search-handle-url/index%3Dbooks%26field-author%3DCynthia%20Gibas/103-1826874-1956647); P. [Jambeck](http://www.amazon.com/exec/obidos/search-handle-url/index%3Dbooks%26field-author%3DPer%20Jambeck/103-1826874-1956647): “*Developing Bioinformatics Computer Skills*” O'Reilly and Assoc. Inc., Sebastopol, CA, USA, 2001.2. K. P. Burnham; D. R. Anderson: “*Model Selection and Multi-Model Inference : A Practical Information-Theoretic Approach* *(2Rev ed)*” Springer, Berlin, 2004.3. W. Kabsch; C. Sander, Dictionary of protein secondary structure: pattern recognition of hydrogen-bonded and geometrical features, *Biopolymers* 22 (1983) 2577-2637.4. P. Y. Chou; G. D. Fasman, Prediction of the secondary structure of proteins from their amino acid sequence, *Adv. Enzymol*. 47 (1978) 45-148.5. A. Šali; T. L. Blundell, Comparative protein modeling by satisfaction of spatial restrains,*J Mol Biol*. 234 (1993) 779-815.6. C. A. Lipinski; F. Lombardo; B. W. Doming; P. J. Feeney, Experimental and computational approaches to estimate solubility and permeability in drug discovery and development settings, *Adv. Drug. Deliv*. 23 (1997) 3-25.7. C. Hansch; T. J. Fujita, ρ-σ-π Analysis, A method for the correlation of biological activity and chemical structure, *J. Am. Soc.* 86 (1964) 1616-1626.8. S. M. Free Jr.; J. W. Wilson, A mathematical contribution to structure activity studies, *J. Med. Chem.* 7 (1964) 395-399. |
| **Način praćenja kvalitete i uspješnosti izvedbe (evaluacija):** |  |
| Upitnici nakon održanih 10 sati i na kraju predavanja/vježbi. Rasprava sa studentima i kolegama. Praćenje napredovajna svakoga studenta. Uspješnost kolegija evaluirat će svake godine zajedničko stručno povjerenstvo Instituta "Ruđer Bošković", Sveučilišta u Dubrovniku i Sveučilišta u Osijeku. |