|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **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  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=books&field-author=Cynthia%20Gibas/103-1826874-1956647); P. [Jambeck](http://www.amazon.com/exec/obidos/search-handle-url/index=books&field-author=Per%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. | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |