

Kod kolegija	BIL307			
Naziv kolegija	KEMOINFORMATIKA (analize strukture i funkcije biomolekula računalnim metodama)			
Opći podaci				
Studijski program	Preddiplomski studij Biotehnologija i istraživanje lijekova	Godina	III	
Nositelj kolegija	Doc. dr. sc. Željko Svedružić			
Bodovna vrijednost i način izvođenja nastave				
Nositelj kolegija	Broj sati			
	Predavanja	Seminari	Vježbe	Ukupno
Doc. dr. sc. Željko Svedružić	25	7	3	35
Suradnici	Predavanja	Seminari	Vježbe	Ukupno
	Patrik Nikolić, Vedran Miletić			
ukupno	25	7	3	35
Status kolegija	Obvezatan		Izborni	
ECTS koeficijent opterećenja studenta				3
Obrazloženje:				
Ciljevi kolegija:				
Cilj je upoznati studente sa osnovnim informatičkim metodama koje se koriste za analize strukture i funkcije biomolekula.				
Razvijanje općih i specifičnih kompetencija (znanja i vještina):				
<i>Prva cjelina:</i> Prikazivanje i analiza bioloških molekula na osobnom računalu koristeći paket programa <i>PyMol</i> (www.pymol.org), te u manjoj mjeri programom <i>Chimera</i> . Analize: strukturnih domena, aktivnih mjesta, <i>b</i> -faktora, površinskih potencijala, oblika, i hidrofobnosti. Kristalografske i NMR strukture molekula.				
<i>Druga cjelina:</i> Analize strukture, te kemiskih i fizičkih svojstava malih molekula. Osnovne <i>QM</i> metode na malim molekulama.				
<i>Treća cjelina:</i> Numerička analiza i optimizacija protein-ligand vezanja i enzimatskih reakcija. Analize molekularnih interakcija npr. <i>IC50</i> , <i>EC50</i> , <i>Kd</i> krivulja (<i>Excel</i>), te analize enzimске aktivnosti (program <i>Tenua</i> , <i>KinTek</i>). Best-fit analize eksperimentalnih rezultata (<i>SciDavis</i>).				
Okvirni sadržaj kolegija:				
Na prvom predavanju studenti će dobiti sve programe i popratnu literaturu. Tijekom kolegija studenti će paralelno s predavačem na svom računalu raditi vježbe kako bi direktno upoznali stručne pojmove i koncepte.				
Način izvođenja nastave i usvajanje znanja				
Predavanja	Seminari i radionice	Vježbe	Samostalni zadaci	Multimedija i Internet
Obrazovanje na daljinu	Konzultacije	Laboratorij	Mentorski rad	Terenska nastava
Potrebna predznanja: položen sveučilišni kolegij biokemije, te poznavanje programa Excel.				
Obveze studenata				
Studenti imaju obavezu tijekom predavanja tražiti od predavača da im se razjasne pojmovi koje ne razumiju. Svaki student mora nositi na kolegij USB spremnik od najmanje 4 GB memorije. Bilo bi poželjno kada bi studenti nosili na kolegij svoja prijenosna računala. Ovaj kolegiji je sinteza cjelokupnog gradiva koje su studenti stekli u posljednje tri godine studija. Da bi uspješno pratili kolegij od studenta se očekuje da su tijekom studija uspješno savladali prijašnje kolegije, poimenice: opću i organsku kemiju, biokemiju, fizikalnu i analitičku kemiju, bioorgansku kemiju, molekularnu genetiku, matematiku i statistiku,				

informatiku i program Excel, osnove sveučilišne fizike, farmakologiju, te razvoj bioeseja. U prikazivanju slika različitih molekularnih analiza studenti mogu koristiti i svoje umjetničke sposobnosti. Apsolutno se ne prihvaćaju izgovori tipa: "davno smo učili biokemiju i sve smo zaboravili, nije nam nitko naglasio da moramo znati prepoznati strukture amino kiselina i DNA molekula".

Prisustvo na predavanjima je važno. Internet i različite publikacije sadrže golemu količinu informacija u kojima se neiskusni student može lako izgubiti. Stoga će studentima biti teško dobiti zadovoljavajuću ocjenu ako nisu bili prisutni na predavanjima..

Praćenje i ocjenjivanje studenata, način polaganja ispita:

Pohađanje nastave	Aktivnost u nastavi	Seminarski rad	Eksperimentalni rad
Pismeni ispit	Usmeni ispit	Esej	Istraživanje
Projekt	Kontinuirana provjera znanja	Referat	Praktični rad

Praćenje i ocjenjivanje studenata, način polaganja ispita biti će odrađeno po pravilniku:

http://www.uniri.hr/files/staticki_dio/propisi_i_dokumenti/Pravilnik_o_studijima-procisceni_tekst.pdf

Vježbe: Tijekom svakog predavanja studenti moraju raditi vježbe predstavljene na predavanju. Radit će se 10 vježbi u skladu s predstavljenim izvedbenim planom. Studenti moraju elektronički potpisati i pohraniti na računalo rezultate vježbi koje su napravili. Vježbe predstavljaju materijali dokaz da je studenti fizički i mentalno prisustvovali na nastavi. Stoga, studenti neće moći dobiti prolaznu ocjenu ako imaju manje od 70% vježbi pohranjenih na računalo.

Domaće zadaće: tijekom kolegija studenti mogu izabrati neke od 10 domaćih zadaća koje su opisane u predstavljenim izvedbenom planu. Domaće zadaće predstavljanju materijalni dokaz da su studenti nakon predavanja samoinicijativno studirali vježbe predstavljene na predavanjima. Domaće zadaće ocjenjivat će se po principu: prolazno:ne-prolazno. Domaće zadaće idu u konačnu ocjenu prema sljedećoj skali:

Broj prolaznih zadaća	10	9	8	7	6	5	4	3	2	1
Dodatak konačnoj ocjeni u %	20%	18%	16%	14%	12%	10%	8%	6%	4%	2%

Sve domaće zadaće treba poslati kao JEDAN PDF dokument na adresu insilico_ri@yahoo.com, najkasnije DVA dana nakon drugog pismenog ispita. Ako se pokaže da dva studenta imaju isti tekst, ili iste slike u domaćim zadaćama, oba studenta dobiti će neprolaznu ocjenu iz tih zadaća. Također, studenti će dobiti neprolaznu ocjenu ako u zadaćama plagiraju slike ili tekstove sa interneta.

Pismeni ispiti: Studenti će imati dva pismena ispita u skladu s predstavljenim izvedbenim planom. Pitanja na pismenim ispitima pokriti će potrebno predznanja te gradivo predstavljeno na predavanjima. Studenti će tijekom predavanja biti upozoreni koji dijelovi predavanja predstavljaju minimalno znanje za koju ocjenu. Direktno nakon svakog pismenog ispita nositelj kolegija predstavit će studentima odgovore na ispitna pitanja. Studenti imaju pravo javno diskutirati pitanja i odgovore, te kriterije ocjenjivanja sa svojim kolegama i s nositeljem kolegija. Studenti imaju pravo dobiti na uvid svoje ispravljene ispite. Na žalost zbog praktičnih razloga nositelj kolegija ne može studentima dati riješene pismene ispite u trajno vlasništvo.

Konačna ocjena: Studentima će biti predložena konačna ocjena na osnovu rezultata, vježbi, domaćih zadaća, te pismenih ispita. Domaće zadaće nose 20% ocjene, drugih 80% ocjene dolazi u obliku skupne ocjene s pismenih ispita. Različite mogućnosti sažete su u tablici:

postotak iz pismenih ispita	postotak iz domaćih zadaća										
	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
0	0	2	4	6	8	10	12	14	16	18	20
5	4	6	8	10	12	14	16	18	20	22	24
10	8	10	12	14	16	18	20	22	24	26	28
15	12	14	16	18	20	22	24	26	28	30	32
20	16	18	20	22	24	26	28	30	32	34	36
25	20	22	24	26	28	30	32	34	36	38	40
30	24	26	28	30	32	34	36	38	40	42	44
35	28	30	32	34	36	38	40	42	44	46	48
40	32	34	36	38	40	42	44	46	48	50	52
45	36	38	40	42	44	46	48	50	52	54	56
50	40	42	44	46	48	50	52	54	56	58	60
55	44	46	48	50	52	54	56	58	60	62	64
60	48	50	52	54	56	58	60	62	64	66	68
65	52	54	56	58	60	62	64	66	68	70	72
70	56	58	60	62	64	66	68	70	72	74	76
75	60	62	64	66	68	70	72	74	76	78	80
80	64	66	68	70	72	74	76	78	80	82	84
85	68	70	72	74	76	78	80	82	84	86	88
90	72	74	76	78	80	82	84	86	88	90	92
95	76	78	80	82	84	86	88	90	92	94	96
100	80	82	84	86	88	90	92	94	96	98	100

Na primjer ako student ima skupno 90% iz pismenih ispita, i 80% uspješnih domaćih zadaća, konačna ocjena će biti 88% (i.e. $90\% \cdot 0.8 + 80\% \cdot 0.2 = 72\% + 16\% = 88\%$). U skladu s pravilnikom konačna ocjena će biti određena prema tablici:

postotak:	80%-100%	70-79%	60-69%	50-59%	40-49%
ocjena:	5 (A)	4 (B)	3 (C)	2 (D)	2 (D-)

Usmeni ispit: Studenti koji nisu zadovoljni s predloženom konačnom ocjenom mogu zatražiti usmeni ispit. Na usmenom ispitu studenti mogu dobiti bolju (ili lošiju) ocjenu od predložene konačne ocjene. Usmeni ispiti će se održavati isključivo na računalima slično kao i vježbe na predavanjima. Na usmenom ispitu mora biti minimalno dva a najviše četiri studenta. Studenti na usmenom ispitu moraju znati odgovore na pitanja na koje nisu mogli odgovoriti na pismenom ispitu, te moraju objasniti rezultate analiza koje su predstavili u domaćim zadaćama.

Ishodi učenja:

Po završetku kolegija svi studenti će biti sposobni na svom računalu prikazati strukture različitih biomolekula, te objasniti osnovna funkcionalna svojstva prikazanih molekula. Svi studenti će biti sposobni numerički optimizirati i analizirati različita mjerenja molekularnih interakcija i enzimatske aktivnosti. Kolegij može poslužiti kao uvod za sve one koji se žele u budućnosti posvetiti izučavanju i korištenju naprednijih informatičkih metoda.

Obvezna literatura:

Sve potrebne programe, i svu potrebnu literaturu (PDF) studenti će dobiti na prvom predavanju. Excel program studenti moraju sami osigurati na svom prijenosnom računalu.

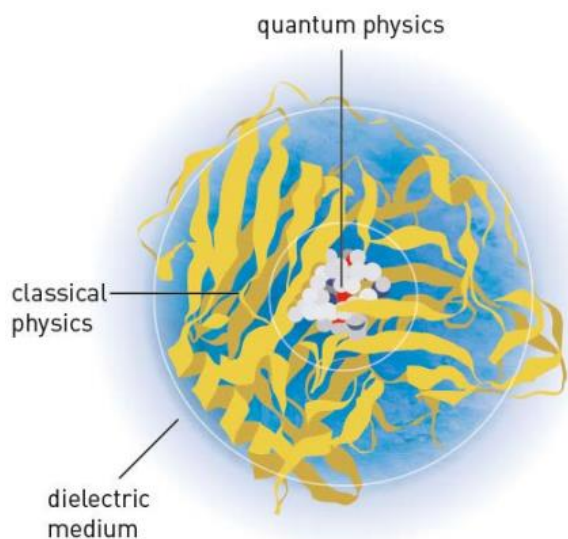
Izborna literatura:

Internet.

Način praćenja kvalitete i uspješnosti izvedbe:

Kroz direktan kontakt s predavačem

Želimo svima uspješno i ugodno modeliranje:



 The Nobel Prize in Chemistry 2013
Martin Karplus, Michael Levitt, Arieh Warshel

Share this:      859

The Nobel Prize in Chemistry 2013



Photo: A. Mahmoud
Martin Karplus
Prize share: 1/3



Photo: A. Mahmoud
Michael Levitt
Prize share: 1/3

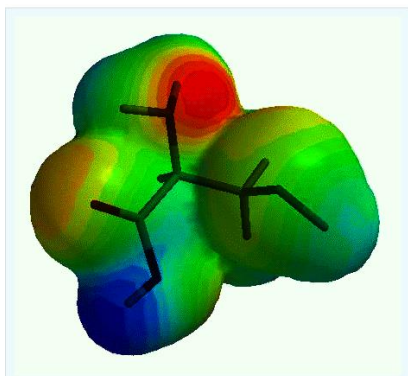


Photo: A. Mahmoud
Arieh Warshel
Prize share: 1/3

The Nobel Prize in Chemistry 2013 was awarded jointly to Martin Karplus, Michael Levitt and Arieh Warshel "for the development of multiscale models for complex chemical systems".

Photos: Copyright © The Nobel Foundation

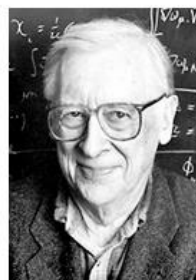
http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2013/



The Nobel Prize in Chemistry 1998



Walter Kohn
Prize share: 1/2



John A. Pople
Prize share: 1/2

The Nobel Prize in Chemistry 1998 was divided equally between Walter Kohn "for his development of the density-functional theory" and John A. Pople "for his development of computational methods in quantum chemistry".

http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1998/

Kod kolegija:	BIL308		
Naziv kolegija:	KEMOINFORMATIKA (analiza strukture i funkcije biomolekula računalnim metodama)		
Studijski program:	Preddiplomski sveučilišni studij "Biotehnologija i istraživanje lijekova"	Godina:	II
Nositelj kolegija:	doc. Željko Svedružić dr.sc.		

Predavanje broj:	Gradivo koje će biti predstavljeno na predavanju:
1.	Osnove kristalografskih i NMR metoda za analize strukture makromolekula. Predstavljanje baza podataka koje sadrže molekularne strukture. Organizacija PDB dokumenata i algoritmi za prikaz molekula na računalima. Radit će se analize strukturnih domena, aktivnih mjesta, b-faktora, te površinskih oblika, elektrostatičkih potencijala i hidrofobnosti. Osnove usporedbe struktura pomoću izračuna RMSD vrijednosti. Prikaz i analiza strukture bioloških makromolekula pomoću PyMol, Chimera, i SwissPDBviewer programskih paketa za molekularno modeliranje.
2.	DNA i RNA molekule, te proteini koji se vežu na DNA i RNA molekule. Oštećenja i popravak DNA, DNA metilacija i epigenetički mehanizmi će biti prikazani kao ilustrativan primjer najnovijih istraživanja.
3.	Biološke membrane, membranski receptori, ionski kanali.
4.	Izračun različitih svojstva malih molekula. Poimenice, molekularna dinamika, molekularne konformacije, 3D preklapanja, LogP i LogD vrijednosti, pKa vrijednosti, tautomeri i enantiomeri, te NMR, IR, uv-vis, ORD i CD spektri. Programi ChemAxonMarvin, Avogadro, GAMESS-MacMolPlot, i Wavefunction Spartan.
5.	QM/MM analize graničnih orbitala, strukture i reaktivnosti molekula. Programi Avogadro-GAMESS-MacMolPlot and WaveFunction-Spartan.
6.	Prvi pismeni ispit , nakon ispita biti će otvorena diskusija ispitnih pitanja
7.	Osnovne analize aktivnosti enzima pomoću numeričkih simulacija s programima Tenua, KinTek, i MS Excel. Studenti će naučiti što je katalitički ciklus te kako koncentracije enzima i supstarata utječe na mjerenje aktivnosti enzima. Studenti će naučiti kako odrediti koncentraciju aktivnog enzima u reakciji.
8.	Osnovne analize mehanizma molekularnih interakcija. Programi MS Excel i SciDavis koriste će se za numeričke simulacije različitih tipova doznih krivulja. Nelinearne regresije koriste će se za izračun, IC50, EC50, Hill-ovih koeficijenata i Kd vrijednosti
9.	Ponavljanje predstavljenog gradiva u obliku studentskih seminara i otvorene diskusije
10.	Ponavljanje predstavljenog gradiva u obliku studentskih seminara i otvorene diskusije
11.	Drugi pismeni ispit , nakon ispita biti će otvorena diskusija ispitnih pitanja

Predavanja počinju u 12 sati, u sobi 364, 6. listopada 2014 godine.

Sva predavanja će se održati u računalnoj učionici O-364. Svaki student slijediti će predavanja radeći vježbe na jednom od računala u učionici. Studenti koji imaju osobno prijenosno računalo mogu donijeti svoja računala na predavanja kako bi pripremili osobna računala za pisanje domaćih zadaća. Studenti koji ne mogu pisati domaće zadaće kod kuće, moći će u predviđenim terminima pisati domaće zadaće u računalnoj učionici. Studenti će biti podjeljeni u dvije grupe po 20 studenata.

Raspored učionice O-364 za listopad 2014. godine:

Predavanja i vježbe broj	Datum	Slobodni sati
1	8.12. 2014.	Prva grupa: 12:00 – 14:00 Druga grupa: 14:00 – 16:00 Vježbe: 16:00 – 18:00
2	9.12.2014.	Prva grupa: 8:00 – 10:00 Druga grupa: 10:00 – 12:00 Vježbe: 12:00 – 14:00
3	10.12.2014.	Prva grupa: 10:00 – 12:00 Druga grupa: 12:00 – 14:00 Vježbe: 14:00 – 16:00
4	11.12.2014.	Prva grupa: 8:00 – 10:00 Druga grupa: 10:00 – 12:00 Vježbe: 12:00 – 14:00
5	12.12.2014.	Prva grupa: 14:00 – 16:00 Druga grupa: 16:00 – 18:00 Vježbe: 18:00 – 20:00
Prvi pismeni ispit predavaona 0-30	15.12.2014.	17:00
6	16.12. 2104.	Prva grupa: 8:00 – 10:00 Druga grupa: 10:00 – 12:00 Vježbe: 12:00 – 14:00
7	17.12. 2014.	Prva grupa: 12:00 – 14:00 Druga grupa: 14:00 – 16:00 Vježbe: 16:00 – 18:00
8	18.12.2014.	Prva grupa: 8:00 – 10:00 Druga grupa: 10:00 – 12:00 Vježbe: 12:00 – 14:00
9	19.12.2014.	Prva grupa: 14:00 – 16:00 Druga grupa: 16:00 – 18:00 Vježbe: 18:00 – 20:00
Drugi pismeni ispit predavaona 0-30	20.10.2014.	17:00