

| | | | | |
|--|---|----------|---------|-----------|
| Kod kolegija: | MK202 | | | |
| Naziv kolegija: | DIZAJN BIOLOŠKI AKTIVNIH MOLEKULA RAČUNALNIM METODAMA | | | |
| Opći podaci: | | | | |
| Studijski programi: | Diplomski studij Istraživanje i razvoj lijekova, Diplomski studij Medicinska kemija, Diplomski studij Biotehnologija u medicini | Godina | II | |
| Nositelj kolegija: | <i>doc.dr.sc. Željko Svedružić</i> | | | |
| Bodovna vrijednost i način izvođenja nastave: | | | | |
| Nositelj kolegija | Broj sati | | | |
| | Predavanja | Seminari | Vježbe | Ukupno |
| <i>doc. dr.sc. Željko Svedružić</i> | 20 | 8 | 20 | 48 |
| Suradnici: | Predavanja | Seminari | Vježbe | Ukupno |
| Vedran Miletić, UniRi, odjel za informatiku | | | | |
| pozvani vanjski predavači | | | | |
| | | | | |
| ukupno | 20 | 8 | 20 | 48 |
| Status kolegija: | <u>Obvezatan</u> | | Izborni | |
| ECTS koeficijent opterećenja studenta | | | | 5 |
| Obrazloženje: 20 sata nastave + 20 sati praktičnih vježbi za računalom + 8 sati studentskih seminara | | | | |
| Ciljevi kolegija: | | | | |
| <p>Studenti su na trećoj godini naučili analizirati strukture i funkcije biomolekula računalnim metodama na kolegiju kemoinformatike. Na ovom kolegiju fokusirat ćemo se na molekularne interakcije, te na molekularni i metabolički inženjering. Naučit ćemo kako molekularna dinamika strukturno i energetski utječe na molekularne interakcije. Pokriti ćemo osnovne enzimске kinetike te numeričke analize protein-ligand interakcija. Studenti će naučiti kako numerički razlikovati molekularne mehanizme, te kako numerički optimizirati eksperimentalne metode za izučavanje specifičnih mehanizama. Analize metaboličkih puteva osposobit će studente za odabir ključnih molekula u regulaciji bioloških procesa prilikom dizajna novih lijekova ili u metaboličkom inženjeringu.</p> <p>Pojedinačna predavanja su opisana u izvedbenom planu koji je predstavljen na kraju ovog dokumenta. Kolegij je sastavljen u skladu sa sličnim kolegijima na vrhunskim svjetskim sveučilištima (veliki broj sličnih predavanja može se naći na internetu). Svaki student slijedit će predavanja na jednom od računala u računalnoj učionici O-364, predavanja će paralelno predstaviti vježbe i popratne teoretske koncepte. Na prvom predavanju studenti će dobiti oko 20 različitih programa koji se koriste za ispitivanje strukture i funkcije bioloških molekula s popratnom literaturom u PDF obliku. Studenti mogu instalirati programe na svoja računala te tijekom predavanja slijediti predavača u predstavljenim analizama. Nobelove nagrade za kemiju 1998 i 2013 godine dodijeljene su znanstvenicima koji su razvili metode koje će biti predstavljene na kolegiju</p> <p>http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2013/ http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1998/</p> | | | | |
| Razvijanje općih i specifičnih kompetencija (znanja i vještina): | | | | |
| <ul style="list-style-type: none"> - upoznavanje s mogućnostima i načinom rada današnjih programa za analizu strukture i funkcije biomolekula - osposobljavanje za rad na analizama strukture i funkcije biološki aktivnih molekula na osobnom računalu - osposobljavanje za kritičko vrednovanje rezultata računalnih metoda za ispitivanje strukture i funkcije biomolekula - osposobljavanje za razumijevanje odgovarajuće literature. | | | | |
| Okvirni sadržaj kolegija: | | | | |
| Na početku svakog predavanja studenti će se upoznati s prirodom problema koji želimo riješiti računalnim pristupom. Zatim će biti predstavljeni programi koji mogu napraviti željene analize. Predavač | | | | |

| | | | | |
|--|------------------------------------|----------------------|---------------------------------|--------------------------------------|
| <p>će direktno pred studentima na svom računalu prikazivati kako se koriste različiti programi tako da studenti mogu pratiti predavača na svojim računalima. Za početak studentima će biti pokazani jednostavni modeli pomoću kojih se može provjeriti da li predstavljeni programi daju očekivane rezultate, te koje su prednosti i ograničenja svakog od promatranih programa. Paralelno s prikazom rada pojedinih programa predavač će okvirno objašnjavati algoritme na kojima se programi zasnivaju. U sljedećem koraku biti će pokazani konkretni primjeri kako su prikazane analize pomogle u razvoju novih tehnologija (lijekova), te kako predavač koristi prikazane metode u svom istraživanju. Na kraju svakog predavanja predviđena je otvorena diskusija prikazanog gradiva.</p> | | | | |
| <p>Način izvođenja nastave i usvajanje znanja</p> | | | | |
| <p>Predavanja</p> | <p>Seminari i radionice</p> | <p>Vježbe</p> | <p>Samostalni zadaci</p> | <p>Multimedija i Internet</p> |
| <p>Obrazovanje na daljinu</p> | <p>Konzultacije</p> | <p>Laboratorij</p> | <p>Mentorski rad</p> | <p>Terenska nastava</p> |
| <p>Komentari: studenti mogu predavanja koja slušaju uspoređivati s predavanjima na vrhunskim svjetskim sveučilištima koja se mogu naći na internetu.</p> | | | | |
| <p>Obveze studenata:</p> | | | | |
| <p>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 četiri godine studija. Da bi uspješno pratili kolegij od studenta se očekuje da su tijekom studija uspješno savladali prijašnje kolegije, poimence: opću i organsku kemiju, biokemiju, fizikalnu i analitičku kemiju, medicinsku i bioorgansku kemiju, molekularnu genetiku, matematiku i statistiku (posebice nelinearne regresije), 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.</p> | | | | |
| <p>Ishodi učenja:</p> | | | | |
| <p>Kolegij predstavlja idealnu mogućnost za sintezu i učvršćivanje različitih znanja stečenih tijekom studija, te podizanje profesionalnog samopouzdanja. Uspješan završetak kolegija trebao bi studentima omogućiti da u budućem poslu mogu samostalno koristiti računalne metode za ispitivanje strukture i funkcije biomolekula. Stečena znanja mogu poslužiti kao temelj za daljnji razvoj profesionalne osposobljenosti za istraživanje strukture i funkcije biomolekula računalnim pristupima. Ovaj kolegij predstavlja studentima biomedicinske tehnologije idealnu mogućnost da steknu znanja i sposobnosti koja nisu pokrivena u sličnim studijima na drugim fakultetima.</p> | | | | |
| <p>Obvezna literatura:</p> | | | | |
| <p>Svu potrebnu literaturu studenti će dobiti na prvom predavanju u obliku PDF dokumenata.</p> | | | | |
| <p>Izborna literatura:</p> | | | | |
| <p>Internet</p> | | | | |
| <p>Način praćenja kvalitete i uspješnosti izvedbe:</p> | | | | |
| <p>Studenti mogu na internetu naći video predavanja i tekstualne opise sličnih kolegija sa vrhunskih svjetskih sveučilišta. Studenti mogu tijekom predavanja ili na kraju predavanja postavljati pitanja, te na kraju kolegija u anketama ocijeniti organizaciju kolegija i predavača. Nakon pismenog ispita studenti mogu javno diskutirati pitanja postavljena na ispitu te kriterije ocjenjivanja. Studenti mogu kontaktirati voditelja kolegija izvan predavanja putem e-pošte:: insilico_ri@yahoo.com.</p> | | | | |

Praćenje i ocjenjivanje studenata, način polaganja ispita:

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 predstavljaju 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 tjedan 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 predstaviti 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 |

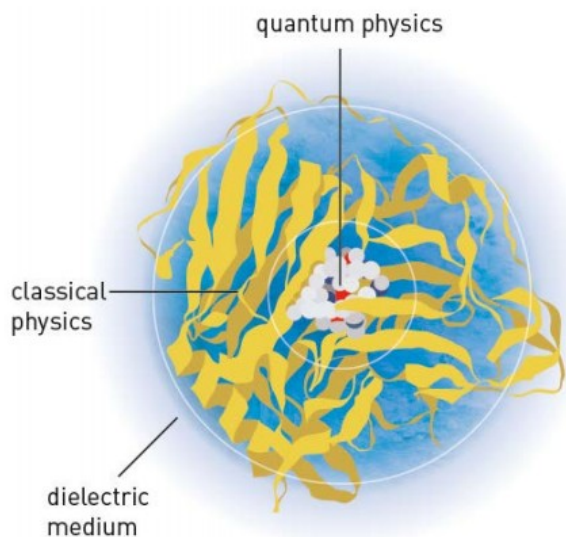
Na primjer ako student ima skupno 90% iz pismenih ispita, i 80% uspješnih domaćih zadaća, konačna ocjena će biti 88% (i.e. $90\% \cdot 0.8 + 80\% \cdot 0.2 = 72\% + 16\% = 88\%$). U skladu s pravilnikom konačna ocjena će biti određena prema tablici:

| | | | | | |
|------------------|----------|--------|--------|--------|--------|
| postotak: | 90%-100% | 80-89% | 70-79% | 60-69% | 50-59% |
| 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.

| | | | |
|---------------------------------|-----------------------------------|-----------------------|-----------------------------|
| <u>Pohadanje nastave</u> | <u>Aktivnost u nastavi</u> | Seminarski rad | Eksperimentalni rad |
| <u>Pismeni ispit</u> | <u>Usmeni ispit</u> | Esej | Istraživanje |
| Projekt | Kontinuirana provjera znanja | <u>Referat</u> | <u>Praktični rad</u> |

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/

| | | | |
|-------------------------|---|---------|----|
| Kod kolegija: | MK202 | | |
| Naziv kolegija: | DIZAJN BIOLOŠKI AKTIVNIH MOLEKULA RAČUNALNIM METODAMA | | |
| Studijski program: | Diplomski studij Istraživanje i razvoj lijekova, Diplomski studij Medicinska kemija, Diplomski studij Biotehnologija u medicini. | Godina: | II |
| Nositelj kolegija: | <i>doc. dr.sc. Željko Svedružić</i> | | |
| Predavanje broj: | Gradivo koje će biti predstavljeno na predavanju: | | |
| 1. | <p>Kristalografske i NMR metode za analize dinamičnih promjena u strukturi biomolekula. Analize protein-ligand, protein-protein, protein-otapalo i ligand-otapalo interakcija koristeće se za prikaz različitih sila koje reguliraju interakcije među molekulama. Studenti će naučiti što su dinamične petlje u proteinskim strukturama, što je energetski lijevak stvaranja proteinskih struktura (protein-folding funnel), što je proteinski inženjering, te što je supramolekularna organizacija i direktno prosljeđivanje supstrata (substrate channeling). Koristit će se programi Pymol, Chmiera, VMD, APBS, i PDB2PQR.</p> <p>Domaća zadaća: studenti po svojoj želji mogu odabrati omiljenu molekulu u PDB bazi podataka, te opisati svojstva odabrane molekule koristeći analize predstavljene na predavanju.</p> | | |
| 2. | <p>Različiti primjeri međumolekularnih interakcija i popratnih promjena u molekularnoj dinamici. Prikazani primjeri pokriti će DNA i RNA molekule, te proteine i lijekove koji se vežu na DNA i RNA molekule. Prikazat će se različite biološke membrane, membranski receptori, ionski kanali, te lijekovi koji djeluju na membranske proteine. Koristit će se programi Pymol, Chmiera, i VMD.</p> <p>Domaća zadaća: studenti po svojoj želji mogu odabrati omiljenu molekulu u PDB bazi podataka, te opisati svojstva odabrane molekule koristeći analize predstavljene na predavanju.</p> | | |
| 3. | <p>Analiza bioisostera i farmakofornih grupa kroz usporedbu molekularnih konformacija te 3D preklapanjima po funkcionalnim grupama i strukturalnim sličnostima. Izračun različitih fizikalnih svojstva malih molekula koji definiraju interakcije, primjerice: LogP i LogD vrijednosti, pKa vrijednosti, tautomerni i enantiomeri. Računati će se elektronski oblaci označeni prema elektrostatičkim i ionizacijskim potencijalima, te prema apsolutnim HOMO-LUMO energijama. Opisat će se dijelovi strukture koji odabranom ligandu omogućavaju vezanje u prikazani kompleks, te dijelovi koji se mogu modificirati da bi se poboljšala ADME svojstva. Osnove QSAR i SAR metoda. Programi Cresset (Torch, Forge, Blaze i Spark), ChemAxonMarvin, Avogadro, Schrödinger-Maestro, i Wavefunction-Spartan.</p> <p>Domaća zadaća: studenti po svojoj želji mogu u PDB bazi podataka odabrati omiljeni ligand vezan za neku makromolekulu, te analizirati odabrani kompleks metodama koje su naučili na predavanju.</p> | | |
| 4. | <p>Osnove molekularne dinamike biti će prikazane pomoću VMD-NAMD simulacija. Izračuni RMSD vrijednosti koristit će se za analizu promjena u strukturi molekula. Studenti će se upoznati s pojmovima kao što su: polje sila, AMBER, CHARMM, NAMD, GROMACS. Studenti će upoznati različite sile koje kontroliraju vezanje među molekulama, te popratne energetske promjene. Studenti će raditi vlastite VMD-NAMD simulacije molekularne dinamike u skladu s računalnim mogućnostima dostupnim na predavanjima. Složenije simulacije prikazat će se koristeći unaprijed pripremljene rezultate VMD-NAMD i GROMACS simulacijama. Prikazat će se dinamične promjene u strukturama proteina, DNA i RNA molekula. Analizirat će se protein-otapalo i protein-ligand veze, te različite biološke membrane i membranski proteini.</p> <p>Domaća zadaća: studenti po svojoj želji mogu odabrati omiljeni protein-ligand kompleks u PDB bazi podataka, te analizirati odabranu molekulu pomoću VMD-NAMD simulacija koje su predstavljene na predavanju.</p> | | |

| | |
|---|--|
| 5. | <p>Studenti će naučiti kako se promjene u strukturi liganda mogu koristiti za optimizaciju vezanja liganda na proteine pomoću programa Chimera-Vina i VMD-NAMD. (engl. protein-ligand docking).</p> <p>Domaća zadaća: studenti po svojoj želji mogu odabrati omiljeni protein-ligand kompleks u PDB bazi podataka, te analizirati interakcije unutar kompleksa koristeći pakete programa Chimera-Vina i VMD-NAMD.</p> |
| 6. | <p>QM-MM-MD metode za analizu katalitičkih procesa u aktivnom mjestu enzima. QM/MM metode koristit će se za analize reakcijskih koordinata, energije prijelaznog stanja, i osnova enzimske katalize. Studenti će raditi vlastite QM-MM-MD simulacije molekularne dinamike u skladu s dostupnim računalnim mogućnostima na predavanjima. Složenije simulacije prikazat će se koristeći unaprijed pripremljene rezultate. Studenti će se upoznati kako dizajnirati suicid-inhibitore enzima na osnovu stečenih spoznaja o katalitičkom mehanizmu. Strukture i reaktivnosti molekula biti će prikazane na primjeru razvoja inhibitora citozin DNA metiltransferaza. Programi Avogadro-WinGAMESS-MacMolPlot, CP2K, i WaveFunction-Spartan.</p> <p>Domaća zadaća: studenti po svojoj želji moraju odabrati njihovu omiljenu kemijsku reakciju, kofaktor, ili enzimatski mehanizam za analizu QM-MM-MD metodama koje su predstavljene na predavanju</p> |
| 7. | <p>Modeliranje proteinskih struktura na osnovi homologije u slijedu aminokiselina. Studenti će upoznati UniProt bazu podataka, te Modeler-BLAST, FASTA i ClustalW analize. Studenti će upoznati evoluciju proteinskih domena, te konvergentnu i divergentnu evoluciju proteinskih struktura.</p> <p>Domaća zadaća: studenti po svojoj želji moraju odabrati omiljenu molekulu u PDB bazi podataka, te modelirati jednu homolognu strukturu prema odabranoj molekuli pomoću Chimera-Modeler-BLAST programa.</p> |
| 8-10 | <p>Ponavljanje gradiva predstavljenog na prvih 7 predavanja u obliku studentskih seminara. Cilj seminara je omogućiti otvorenu diskusiju među studentima, te omogućiti studentima da otvoreno postavljaju pitanja predavaču. Seminari trebaju pomoći studentima u pisanju njihovih domaćih zadaća i u pripremi za ispite.</p> |
| 11. | <p>Prvi pismeni ispit, pokriti će material koji je predstavljen na prvih 10 predavanja. Odgovori na ispitna pitanja biti će predstavljeni u otvorenoj raspravi nakon ispita.</p> |
| 12. | <p>Numeričke analize molekularnih interakcija. Različiti tipovi doznih krivulja, Kd, i kon/koff krivulje. Programi MS Excel, Tenua, SciDavis koristit će se za numeričke simulacije i nelinearne regresije. Računati će se IC50 i EC50 vrijednosti, Hill-ovi koeficijenti, Kd vrijednosti, kon i koff konstante. Statistički testovi koristit će se za ispitivanje vjerodostojnosti predstavljenog molekularnog mehanizma.</p> <p>Domaća zadaća: studenti po svojoj želji trebaju numerički dizajnirati virtualni eksperiment koji predstavlja neke od mehanizama koji su predstavljeni na predavanjima</p> |
| 13. | <p>Analize različitih enzimatskih mehanizama pomoću numeričkih simulacija i nelinearne regresije s programima Tenua, KinTek i MS Excel. Različiti tipovi inhibicije i aktivacije enzimske aktivnosti, alosterička regulacija. Reakcije s višestrukim supstratima i produktima, te procesivnost enzima na DNA molekulama. Kinetika pre-stabilnog stanja i kinetika stabilnog stanja. Mjerenja koncentracije aktivnog enzima u složenim otopinama.</p> <p>Domaća zadaća: studenti po svojoj želji moraju numerički simulirati jednim od predstavljenih enzimatskih mehanizama..</p> |
| 14. | <p>Numeričke simulacije i analize metaboličkih puteva pomoću programa Copasi i MS Excel (npr. glikoliza, NFκβ-signalizacija, kaskade fosfataza i kinaza u kontroli cirkadijanih ritmova, ili metabolizam APP proteina u Alzheimerovoj bolesti).</p> <p>Domaća zadaća: studenti po svojoj želji moraju numerički analizirati jedan enzimatski mehanizam ili metabolički proces.</p> |
| 15. | <p>Ponavljanje gradiva predstavljenog na 12,13 i 14 predavanju u obliku studentskih seminara. Cilj seminara je omogućiti otvorenu diskusiju među studentima, te omogućiti studentima da otvoreno postavljaju pitanja predavaču. Seminari trebaju pomoći studentima u pisanju njihovih domaćih zadaća i pripremi za ispite.</p> |
| 16. | <p>Drugi ispit, pokriti će cjelokupno gradivo s naglaskom na material koji je predstavljen na predavanjima 12-14. Odgovori na ispitna pitanja biti će predstavljeni u otvorenoj diskusiji nakon ispita.</p> |
| <p>Predavanja počinju u sobi O-364, 6. listopada 2014 godine.</p> | |
| <p>Sva predavanja će se održati u računalnoj učionici O-364. Svaki student slijedit 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, ili za buduće potrebe</p> | |

u njihovim djelatnostima. Studenti koji ne mogu pisati domaće zadaće kod kuće, moći će u predviđenim terminima pisati domaće zadaće u računalnoj učionici. Studenti će biti podijeljeni u dvije grupe po 20 studenata. Prva grupa biti će studenti IRL i BUM smjerova. U drugoj grupi biti će studenti MK smjera, te dragovoljci iz IRL, BUM smjerova koji pokazuju veće zanimanje za molekularne mehanizme.

Raspored učionice O-364 za listopad 2014. godine:

| Predavanja i vježbe broj | Datum | Slobodni sati |
|--|--------------|--|
| 1 | 6.10.2014. | Prva grupa: 12:00 – 14:00 Druga grupa: 14:00 – 16:00 Vježbe: 16:00 – 18:00 |
| 2 | 7.10.2014. | Prva grupa: 8:00 – 10:00 Druga grupa: 10:00 – 12:00 Vježbe: 17:00 – 19:00 |
| 3 | 8.10.2014 | Praznik |
| 4 | 9.10.2014. | Prva grupa: 8:00 – 10:00 Druga grupa: 10:00 – 12:00 Vježbe: 16:00 – 18:00 |
| 5 | 10.10.2014. | Prva grupa: 14:00 – 16:00 Druga grupa: 16:00 – 18:00 Vježbe: 18:00 – 20:00 |
| 6 | 13.10.2014. | Prva grupa: 12:00 – 14:00 Druga grupa: 17:00 – 19:00 Vježbe: 19:00 – 21:00 |
| 7 | 14.10. 2014. | Prva grupa: 8:00 – 10:00 Druga grupa: 10:00 – 12:00 Vježbe: 17:00 – 19:00 |
| 8 | 15.10.2014. | Prva grupa: 8:00 – 10:00 Druga grupa: 12:00 – 14:00 Vježbe: 14:00 – 16:00 |
| 9 | 16.10.2014. | Prva grupa: 8:00 – 10:00 Druga grupa: 13:00-15:00 Vježbe: 15:00 – 17:00 |
| 10 | 17.10.2014. | Prva grupa: 14:00 – 16:00 Druga grupa: 16:00 – 18:00 Vježbe: 18:00 – 20:00 |
| Prvi pismeni ispit predavaona O-30 | 20.10.2014. | 17:00 |
| 12 | 21.10.2014. | Prva grupa: 14:00 – 16:00 Druga grupa: 16:00 – 18:00 Vježbe: 18:00 – 20:00 |
| 13 | 22.10.2014. | Prva grupa: 12:00 – 14:00 Druga grupa: 14:00 – 16:00 Vježbe: 16:00 – 18:00 |
| 14 | 23.10.2014. | Prva grupa: 8:00 – 10:00 Druga grupa: 10:00 – 12:00 Vježbe: 12:00 – 14:00 |
| 15 | 24.10.2014- | Prva grupa: 14:00 – 16:00 Druga grupa: 16:00 – 18:00 Vježbe: 18:00 – 20:00 |
| Drugi pismeni ispit predavaona O-30 | 27.10.2014 | 17:00 |