


Универзитет у Нишу Медицински факултет	СТУДИЈСКИ ПРОГРАМ: ИНТЕГРИСАНЕ АКАДЕМСКЕ СТУДИЈЕ <b>ФАРМАЦИЈА</b> Акредитација 2018	
<b>Назив предмета: ХЕМОИНФОРМАТИКА</b>		
<b>Руководилац предмета: Проф. др Александар Веселиновић</b>		
<b>Статус предмета:</b>	<b>Изборни</b>	
<b>Семестар: VIII</b>	<b>Година студија: IV</b>	
<b>Број ЕСПБ: 3</b>	<b>Шифра предмета: Ф-IV-41.ђ</b>	
<b>Циљ предмета:</b>		
Стицање знања из области хемоинформатике са применом <i>in silico</i> метода у области фармације.		
<b>Исход предмета:</b> (знања, вештине, ставови)		
Од студента се очекује да: <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ познаје основне математичке и информатичке моделе који имају примену у хемоинформатици,</li> <li>▪ развије и анализира квантитативне односе структуре и фармаколошке активности молекула,</li> <li>▪ примени молекулско моделовање.</li> </ul>		
<b>Број часова активне наставе: 30</b>		
<b>Предавања: 30</b>	<b>Практична настава: 0</b>	
<b>Садржај предмета</b>		
<b>Активна настава:</b>		
<b>1. Предавања</b>		
	<b>Број часова:</b>	
1. Увод у хемоинформатику. Упознавање са софтверима који служе за моделовање хемијских структура у дводимензионалном и тродимензионалном пољу. Превођење планарне структуре молекула у SMILES облик (или код).	3	
2. Молекулски дескриптори. Теорија молекулског графа и молекулска топологија. Молекулски „отисак прста“.	2	
3. Успостављање квантитативних односа структуре, особина и дејства лекова. Употреба QSAR и 3D QSAR метода у дизајну лекова – дефиниција, QSAR једначина и анализа. Успостављање QSAR модела за изабрану групу једињења.	4	
4. Методе машинског учења у дизајну лекова. Локализација и мапирање функционалних група на нивоу дводимензионалне (планарне) структуре биомолекула.	3	
5. Успостављање n-QSAR модела (4D, 5D и 6D).	3	
6. Примена хемоинформатике у методи фрагмента.	3	
7. Приступ активног аналога (методологија: одабир тренажне групе, генерисање молекулске структуре; суперпозиционирање молекула и побољшање и експлоатација модела фармакофоре). Идентификација фармакофоре за изабрану групу једињења.	3	
8. Моделовање хомолога циљних места лекова и докинг студије; слабе интеракције и дефинисање природе интеракција лиганд-рецептор: електростатички потенцијал, хидрофобне интеракције, водоничне везе и електронтрансфер интеракција; комплементарни модел молекула лека за молекулско препознавање. Моделовање циљних места лекова и докинг студије – изабрана група једињења.	3	
9. Откривање водећих молекула употребом високо-пропусног скрининга, виртуелног скрининга. Претраживање интернет базе података о физичко-хемијским и фармаколошким особинама за изабрану групу једињења.	3	
10. Комбинаторијална хемија. Претраживање интернет базе података о структурним и фармаколошким аналозима.	3	
<b>Укупно</b>	<b>30</b>	
<b>Препоручена литература:</b>		
J. Gasteiger, T. Engel, Chemoinformatics: A Textbook, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2003.		

<b>Методе извођења наставе:</b>
<ul style="list-style-type: none"><li>▪ Интерактивна теоријска настава</li><li>▪ Консултације</li><li>▪ Факултативна додатна настава</li></ul>
<b>Предмети које је студент обавезан да положи као услов за излазак на завршни испит:</b>
<ul style="list-style-type: none"><li>▪ Нема</li></ul>
<b>Оцена знања:</b> (максимални број поена 100)
<b>Предиспитне обавезе</b>
<ul style="list-style-type: none"><li>▪ Активност у току наставе: до 30 поена</li></ul>
<b>Завршни испит</b>
<ul style="list-style-type: none"><li>▪ Писмени испит: до 70 поена</li></ul>