



Detaljni izvedbeni nastavni plan za kolegij:

KEMOINFORMATIKA: STRUKTURA I FUNKCIJA BIOMOLEKULA

Akadska godina: 2022/2023.

Studij: Preddiplomski sveučilišni studij "Biotehnologija i istraživanje lijekova"

Kod kolegija: BIL307

ECTS bodovi: 3

Jezik na kojem se izvodi kolegij: predavanja: hrvatski/engleski

Nastavno opterećenje kolegija: 25P +7S +3V.

ONLINE: 7S +3V ; $10/35 = 28.5 \%$

Preduvjeti za upis kolegija: položen završni ispit iz kolegija (upisati naziv ako je primjenjivo):

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, bioanorgansku kemiju, farmakologiju, matematiku i statistiku, fiziku, te informatiku i program Excel. Kemoinformatika je interdisciplinarni kolegij, u okviru kolegija očekuje se od studenata da će na računalima primijeniti različita znanja koja su stekli tijekom dosadašnjeg studija.

Nositelj kolegija i kontakt podaci:

Željko M. Svedružić, Ph.D.

e-mail: insilico_ri@yahoo.com

Vrijeme konzultacija: predavač je dostupan na email-u: 24/7. U uredu, u bilo koje vrijeme, bilo koji dan, uz prethodni dogovor s predavačem.

Izvođači i nastavna opterećenja: Kompletnu nastavu drži Željko M. Svedružić Ph.D.

Obavezna literatura i pripadni programi su slobodno dostupna na:

1. <https://svedruziclab.github.io/software.html>
2. <https://www.click2drug.org/>
3. https://scholar.google.com/citations?hl=en&user=fdEi0GkAAAAJ&view_op=list_works&sort



[by=pubdate](#)

4. <https://www.mdpi.com/1999-4923/13/4/514/htm>
5. <https://www.nature.com/articles/s41598-020-67079-2>
6. <https://journals.plos.org/plosone/article?id=10.1371/journal.pone.0174410>
7. <http://www.ks.uiuc.edu/Training/>
8. <https://www.cgl.ucsf.edu/chimera/tutorials.html>
9. <http://www.msg.ameslab.gov/tutorials/tutorials.html>
10. <https://dasher.wustl.edu/chem430/software/learning-avogadro.pdf>
11. <http://pymol.sourceforge.net/newman/userman.pdf>
12. <https://journals.plos.org/plosone/article?id=10.1371/journal.pone.0050759>

Preporučena dodatna literatura (izborna):

1. An Introduction to Medicinal Chemistry 6th Edition. Graham Patrick. Paperback: 832 pages. Publisher: Oxford University Press; 6 edition (June 20, 2017).
2. Lehninger Principles of Biochemistry Seventh Edition. David L. Nelson and Michael M. Cox. W. H. Freeman; Seventh edition (January 1, 2017)
3. Textbook of Biochemistry with Clinical Correlations 7th Edition by Thomas M. Devlin (Editor). John Wiley & Sons; 7 edition (January 19, 2010).

Software:

Studenti koji žele staviti odgovarajući software na svoja računala mogu naći listu s pripadnim opisima na internetu.

Opis predmeta (sažetak i ciljevi kolegija):

Cilj kolegija je omogućiti polaznicima stjecanje znanja i vještina s kojima mogu samostalno raditi osnovne računalne analize strukture i funkcije biomolekula. Predstaviti će se teoretske postavke studija strukture i funkcije molekula paralelno s popratnim računalnim pristupima. Cilj kolegija omogućiti studentima da si vizualno mogu predstaviti gradivo koje su naučili u prijašnjim kolegijima.

Ishodi učenja:

Po završetku kolegija studenti će moći:

1. samostalno pretraživati baze podataka koje sadrže molekularne strukture, te prepoznati različite tipove računalnih zapisa molekularnih struktura
2. Samostalno računati fizikalna svojstva malih molekula i velikih biomolekula
3. Samostalno računati molekularne orbitale i elektronske gustoće na malim molekulama koristeći programe za kvantnu kemiju
4. Prepoznati funkcionalne grupe i fleksibilne dijelove u strukturama malih molekula, te prepoznati funkcionalne dijelove u velikim biomolekulama (proteina, DNA i RNA molekula, biološkim



membrane, složeni ugljikohidrati)

5. Numerički simulirati i optimizirati mjerenja aktivnosti enzima i mjerenja doznih krivulja.

Detaljni sadržaj kolegija (teme/naslovi predavanja, seminara i vježbi):

Predavanja:

- P1. Sažetak gradiva, kroz primjere pokazat ćemo zašto su računalni pristupi važni za biokemiju i dizajn novih lijekova. Većina primjera će biti iz naših istraživanja.
- P2-P3. Izračun i prikaz različitih fizikalnih svojstva malih molekula. Poimenice, molekularna mehanika, molekularna dinamika i molekularne konformacije, 3D preklapanja među molekulama, LogP i LogD vrijednosti, pKa vrijednosti, titracijske krivulje, tautomeri i enantiomeri. NMR spektri. Predstavljanje baza podataka koje sadrže strukture malih molekula. Programi ChemAxonMarvin, Avogadro, VMD.
- P4-P6. QM/MM analize atomskih orbitala, molekularnih orbitala, te HOMO-LUMO orbitala. Programi Avogadro-GAMESS-MacMolPlot and WaveFunction-Spartan.
- P7-P9. Osnove kristalografskih i NMR metoda za analize strukture makromolekula. Predstavljanje baza podataka koje sadrže strukture velikih biomolekula. Organizacija PDB dokumenata i algoritmi za prikaz molekula na računalima.
- P10-P12. Analize strukturnih domena, aktivnih mjesta, b-faktora, te površinskih oblika, elektrostatičkih potencijala i hidrofobnosti. Osnove usporedbe struktura pomoću preklapanja struktura na osnovu slijeda amino kiselina i izračuna RMSD i RMSF vrijednosti. Prikaz i analiza strukture bioloških makromolekula pomoću PyMol, UCSF Chimera, i VMD programskih paketa.
- P13-P15. Strukture proteina. Analize struktura različitih proteina i pripadnih strukturalnih elemenata.
- P16-P18. DNA i RNA molekule, te proteini koji se vežu na DNA i RNA molekule.
- P20-P22. Oštećenja i popravak DNA, DNA metilacija i epigenetički mehanizmi će biti prikazani kao ilustrativan primjer najnovijih istraživanja.
- P23-P24. Biološke membrane i membranski proteini. Membranski receptori i ionski kanali, molekularne osnove Alzheimerove bolesti, neurokemija i psihofarmakologija
- P25. Osnovne analize aktivnosti enzima pomoću numeričkih simulacija s programima KinTek, i MS Excel. Studenti će naučiti što je katalitički ciklus te kako koncentracije enzima i substrata utječe na mjerenje aktivnosti enzima. Studenti će naučiti kako odrediti koncentraciju aktivnog enzima u reakciji.

Seminari:

- S1. Studenti po svojoj želji mogu odabrati njihovu omiljenu malu molekulu za analizu molekularna mehanika, molekularna dinamika i molekularne konformacije,
- S2. Studenti po svojoj želji mogu odabrati njihovu omiljenu malu molekulu za analizu 3D preklapanja među molekulama, LogP i LogD vrijednosti, pKa vrijednosti, titracijske krivulje, tautomeri i enantiomeri. NMR spektri.
- S3. Studenti po svojoj želji mogu odabrati njihovu omiljenu malu molekulu za QM/MM analize atomskih orbitala, molekularnih orbitala, te HOMO-LUMO orbitala.



- S4. Studenti po svojoj želji mogu odabrati njihovu omiljenu biomolekulu za prikaz kristalografskih i NMR metoda za analize strukture makromolekula. Predstavljanje baza podataka koje sadrže strukture velikih biomolekula. Organizacija PDB dokumenata i algoritmi za prikaz molekula na računalima.
- S5. Studenti po svojoj želji mogu odabrati njihovu omiljenu biomolekulu za analize strukturnih domena, aktivnih mjesta, b-faktora, te površinskih oblika, elektrostatičkih potencijala i hidrofobnosti. Osnove usporedbe struktura pomoću preklapanja struktura na osnovu slijeda amino kiselina i izračuna RMSD i RMSF vrijednosti.
- S6. Strukture proteina. Analize struktura različitih proteina i pripadnih strukturalnih elemenata.
- S7. DNA i RNA molekule, te proteini koji se vežu na DNA i RNA molekule.

Vježbe:

- V1. Oštećenja i popravak DNA, DNA metilacija i epigenetički mehanizmi će biti prikazani kao ilustrativan primjer najnovijih istraživanja.
- V2. Biološke membrane i membranski proteini. Membranski receptori i ionski kanali, molekularne osnove Alzheimerove bolesti, neurokemija i psihofarmakologija
- V3. Osnovne analize aktivnosti enzima pomoću numeričkih simulacija s programima KinTek, i MS Excel. Studenti će naučiti što je katalitički ciklus te kako koncentracije enzima i substrata utječe na mjerenje aktivnosti enzima. Studenti će naučiti kako odrediti koncentraciju aktivnog enzima u reakciji.

Obveze, način praćenja i vrednovanje studenata:

Nakon predavanja studenti moraju rezultate svake vježbe napisati kao „**domaću zadaću iz vježbi**“. Sve „domaće zadaće iz vježbi“ treba poslati voditelju kolegija **KAO JEDAN PDF** dokument na adresu insilico_ri@yahoo.com, najkasnije jedan dan nakon drugog pismenog ispita.

Paralelno s „domaćim zadaćama iz vježbi“, studenti trebaju napraviti po svom izboru „**domaće zadaće po želji**“. „Domaće zadaće po želji“ su zamišljene kao izraz kreativnih sloboda studenata. Studenti mogu analizirati svoje omiljene molekule ili dizajnirati nove molekule koristeći znanja koja su stekli na predavanjima i tijekom studija. Sve „domaće zadaće po želji“ treba poslati voditelju kolegija **kao JEDAN PDF** dokument na adresu insilico_ri@yahoo.com, najkasnije jedan dan nakon drugog pismenog ispita.

Sve „domaće zadaće“ ocjenjivat će se po principu „prolazno:ne-prolazno“ za svaku vježbu. Prolaznu ocjenu od 90% dobiti će sve domaće zadaće koje sadrže sve analize koje su predstavljene na satu, i nemaju očite greške koje ukazuju na nepoznavanje temeljnih pojmova. Osobna kreativnost, znači samoinicijativa u izboru vježbi donosi 100%.

Lista zadaća:

- Z1. Studenti po svojoj želji mogu odabrati njihovu omiljenu malu molekulu za analizu molekularna mehanika, molekularna dinamika i molekularne konformacije,
- Z2. Studenti po svojoj želji mogu odabrati njihovu omiljenu malu molekulu za analizu 3D preklapanja među molekulama, LogP i LogD vrijednosti, pKa vrijednosti, titracijske krivulje, tautomeri i enantiomeri. NMR spektri.



- Z3. Studenti po svojoj želji mogu odabrati njihovu omiljenu malu molekulu za QM/MM analize atomskih orbitala, molekularnih orbitala, te HOMO-LUMO orbitala.
- Z4. Studenti po svojoj želji mogu odabrati njihovu omiljenu biomolekulu za prikaz kristalografskih i NMR metoda za analize strukture makromolekula. Predstavljanje baza podataka koje sadrže strukture velikih biomolekula. Organizacija PDB dokumenata i algoritmi za prikaz molekula na računalima.
- Z5. Studenti po svojoj želji mogu odabrati njihovu omiljenu biomolekulu za analize strukturnih domena, aktivnih mjesta, b-faktora, te površinskih oblika, elektrostatickih potencijala i hidrofobnosti. Osnove usporedbe struktura pomoću preklapanja struktura na osnovu slijeda amino kiselina i izračuna RMSD i RMSF vrijednosti.
- Z6. Studenti po svojoj želji mogu odabrati njihov omiljeni protein i opisati njegovu strukturu.
- Z7. Studenti po svojoj želji mogu odabrati njihove omiljene DNA i RNA molekule, te DNA or RNA molekule u kompleksu s proteinom i opisati pripadne strukture.
- Z8. Studenti po svojoj želji mogu odabrati najzanimljivija oštećenja na DNA molekulama i neku od molekula koja sudjeluje u epigenetičkim mehanizmima te opisati pripadne strukture.
- Z9. Studenti po svojoj želji mogu odabrati najzanimljiviji membranski proteini te opisati pripadnu strukturu.
- Z10. Studenti mogu izabrati svoj omiljeni enzimatski mehanizam te simulirati katalitički ciklus i analizirati kako koncentracije enzima i substrata utječu na mjerenje aktivnosti enzima.

Ispitni rokovi:

1. prvi pismeni ispit će se održati u utorak 24. sječanj 2022.
2. drugi pismeni ispit će se održati u ponedjeljak 31. sječanj 2022.
3. studenti moraju predati sve zadaće za ocjenjivanje do 12:00 u utorak 1. veljače 2022. Studenti koji ne predaju minimalno 70% zadaća do predstavljenog datuma nisu zadovoljili potreban minimum i ne mogu dobiti prolaznu ocjenu.
4. drugi ispiti rok 24. ožujka 2022.

Formiranje ocjene (prema Pravilniku o studijima Sveučilišta u Rijeci):

Praćenje i ocjenjivanje studenata, način polaganja ispita bit će odrađeno po pravilniku.

Konačna ocjena: Studentima će biti predložena konačna ocjena na osnovu rezultata domaćih zadaća i pismenih ispita. Studenti ne mogu dobiti prolaznu ocjenu ako nisu napravili obavezne domaće zadaće. Domaće zadaće po želji i prvi pismeni ispit predstavljaju ocjenske bodove iz kontinuiranog dijela nastave. Domaće zadaće po želji nose 25% ocjenskih bodova, prvi pismeni ispit 25% ocjenskih bodova, i završni pismeni ispit donosi 50% ocjenskih bodova.

Studenti koji su tijekom kontinuiranog dijela nastave ostvarili:

- od 0 do 24,9% ocjenskih bodova ne mogu pristupiti završnom ispitu
- više od 25% ocjenskih bodova mogu pristupiti završnom ispitu.

Prema postignutom ukupnom broju ocjenskih bodova dodjeljuju se sljedeće konačne ocjene:

Postotak usvojenog znanja i vještina	ECTS ocjena	Brojčana ocjena
90% do 100%	A	Izvrstan (5)
75% do 89,9%	B	Vrlo dobar (4)



Sveučilište u Rijeci
University of Rijeka



60% do 74,9%	C	Dobar (3)
50% do 59,9%	D	Dovoljan (2)
0% do 49,9%	F	Nedovoljan (1)



Raspored nastave:

Datum	Grupa	Vrijeme	Mjesto	Oblik nastave	Izvođač
11.01.2023.	1	10-11 h	O-339	P1-P3	Željko Svedružić
We	1	11-12 h	O-339	P1-P3	Željko Svedružić
	1	12-13 h	O-339	S1	Željko Svedružić
	2	13-14 h	O-339	S1	Željko Svedružić
	1	14-16 h	O-339	P1-P3	Željko Svedružić
12.01.2023.	1	10-11 h	O-339	P4-P6	Željko Svedružić
Th	1	11-12 h	O-339	P4-P6	Željko Svedružić
	1	12-13 h	O-339	S2	Željko Svedružić
	2	13-14 h	O-339	S2	Željko Svedružić
	1	14-16 h	O-339	P4-P6	Željko Svedružić
13.01.2023.	1	10-11 h	O-339	P7-P9	Željko Svedružić
Fr	1	11-12 h	O-339	P7-P9	Željko Svedružić
	1	12-13 h	O-339	S3	Željko Svedružić
	2	13-14 h	O-339	S3	Željko Svedružić
	1	14-16 h	O-339	P7-P9	Željko Svedružić
16.01.2023.	1	10-11 h	O-339	P10-P12	Željko Svedružić
Mo	1	11-12 h	O-339	P10-P12	Željko Svedružić
	1	12-13 h	O-339	S4	Željko Svedružić



	2	13-14 h	O-339	S4	Željko Svedružić
	1	14-16 h	O-339	P10-P12	Željko Svedružić
17.01.2023.	1	10-11 h	O-339	P13-P15	Željko Svedružić
Tu	1	11-12 h	O-339	P13-P15	Željko Svedružić
	1	12-13 h	O-339	S5	Željko Svedružić
	2	13-14 h	O-339	S5	Željko Svedružić
	1	14-16 h	O-339	P13-P15	Željko Svedružić
18.01.2023.	1	10-11 h	O-339	P16-P18	Željko Svedružić
We	1	11-12 h	O-339	P16-P18	Željko Svedružić
	1	12-13 h	O-339	S6	Željko Svedružić
	2	13-14 h	O-339	S6	Željko Svedružić
	1	14-16 h	O-339	P16-P18	Željko Svedružić
19.01.2023.	1	10-11 h	O-339	P19-P21	Željko Svedružić
Tu	1	11-12 h	O-339	P19-P21	Željko Svedružić
	1	12-13 h	O-339	S7	Željko Svedružić
	2	13-14 h	O-339	S7	Željko Svedružić
	1	14-16 h	O-339	P19-P21	Željko Svedružić
20.01.2023.	1	10-11 h	O-339	P22-P24	Željko Svedružić
Fr	1	11-12 h	O-339	P22-P24	Željko Svedružić



	1	12-13 h	O-339	V1	Željko Svedružić
	2	13-14 h	O-339	V1	Željko Svedružić
23.01.2023.	1	10-11 h	O-339	P25	Željko Svedružić
Mo	1	11-12 h	O-339	V2	Željko Svedružić
	1	12-13 h	O-339	V3	Željko Svedružić
	2	13-14 h	O-339	V2	Željko Svedružić
	2	14-16 h	O-339	V3	Željko Svedružić
24.01.2023.	1	10-11 h	O-339	P25	Željko Svedružić
Tu	1	11-12 h	O-339	V2	Željko Svedružić
	1	12-13 h	O-339	V3	Željko Svedružić
	2	13-14 h	O-339	V2	Željko Svedružić
	2	14-16 h	O-339	V3	Željko Svedružić
19.01.2023 Tu	Svi	17-18 h	0-030	prvi kolokvij	Željko Svedružić
25.01.2023 We	Svi	17-18 h	0-030	Završni ispit	Željko Svedružić

Dodatne informacije:

Način praćenja kvalitete i uspješnosti izvedbe:

Studenti mogu uspoređivati svoja predavanja s materijalom koji se može naći na internetu. Na internetu se mogu naći video predavanja i tekstualni opisi sličnih kolegija s vrhunskih sveučilišta. Naša predavanja su sastavljena u skladu s predavanjima na vrhunskim sveučilištima uz neke male prilagodbe kako bi se program uskladio s našim studijskim programom. Predavanja su otvorenog tipa, tijekom rada na računalima studenti mogu razgovarati s predavačem ili međusobno.

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 ispise. Na žalost zbog praktičnih razloga nositelj kolegija ne može studentima dati riješene pismene ispise u trajno vlasništvo.

Mole se svi studenti da se odazovu vrednovanju kvalitete nastavnog rada nastavnika i suradnika kako bi se na temelju procjena i sugestija mogla unaprijediti nastava na ovom kolegiju. Vrednovanje nastave putem ISVU sustava provodi se aplikacijom „studomat“ na obrascu definiranom na razini Sveučilišta u Rijeci, a rezultati su anonimni. Više informacija o svim aspektima ovog procesa možete pronaći u Priručniku za kvalitetu studiranja Sveučilišta u Rijeci.

Akadska čestitost

Studenti su dužni poštovati načela akademske čestitosti te se upućuju na dokumente Sveučilišta u Rijeci: Etički kodeks Sveučilišta u Rijeci te Etički kodeks za studente. Ako se pokaže da dva studenta imaju isti tekst ili iste slike u domaćim zadaćama, bez obzira tko je prepisivao od koga, oba studenta će dobiti negativne ocjene iz zadaća i neće moći dobiti prolaznu ocjenu iz kolegija. Pitanja ili razgovori bilo kojeg oblika nisu dozvoljeni na pismenim ispitima.