



Detaljni izvedbeni nastavni plan za kolegij:

KEMOINFORMATIKA: STRUKTURA I FUNKCIJA BIOMOLEKULA

Akadska godina: 2023/2024.

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

Preduvjeti za upis kolegija: /

Nositelj kolegija i kontakt podaci:

Titula i ime: doc. dr. sc. Daniela Kalafatovic

Adresa: Sveučilište u Rijeci Odjel za biotehnologiju, ured O-810

tel: 051/584-588

e-mail: daniela.kalafatovic@uniri.hr

Vrijeme konzultacija: Konzultacije su moguće uz prethodni dogovor putem e-pošte svakodnevno prije ili poslije nastave.

Izvođači i nastavna opterećenja:

Doc. dr. sc. Daniela Kalafatović

Marko Babić



Obavezna literatura i pripadni programi su slobodno dostupna na:

1. <https://www.click2drug.org/>
2. <http://pymol.sourceforge.net/newman/userman.pdf>
3. https://pymolwiki.org/index.php/Selection_Algebra
4. [Gallery - PyMOLWiki](#)
5. [Pymol-Scripts/PyMol-script-repo: Collected scripts for Pymol \(github.com\)](#)
6. [Getting started - GROMACS 2023.2 documentation](#)
7. [GROMACS Tutorials \(mdtutorials.com\)](#)
8. [Slurm Workload Manager - sbatch \(schedmd.com\)](#) (How to use Bura)
9. [Open source molecular modeling - ScienceDirect](#)
10. [filipsPL/ABChemoinformatics: :ab: ABC of chemoinformatics \(github.com\)](#)
11. https://chem.libretexts.org/Courses/Intercollegiate_Courses/Cheminformatics

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 odgovarajuće software-e na osobno računalo to mogu učiniti samostalno:

- 1) PyMol
- 2) Avogadro
- 3) GROMACS
- 4) VMD
- 5) Bilo koji instalirani Python IDE

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 (peptida). 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:

1. Samostalno pretražiti baze podataka Uniprot i RCSB PDB
2. Samostalno analizirati i razumjeti SMILES i PDB zapis
3. Skidati, filtrirati i pročistiti podatke za analizu
4. Stvoriti molekulu za simulaciju u Avogadru i PyMol-u
5. Pripremiti simulacijski sistem preko CHARMM-GUI-a
6. Pokrenuti i analizirati simulaciju molekularne dinamike preko GROMACS programa
7. Analizirati podatke preko Excela
8. Koristiti Python za pozivanje API zahtjeva

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

Predavanja:

P1: Uvodno predavanje

P2: Uvod u kemoinformatiku – predavanje koje će objasniti što je podatak, što su baze podataka, kako se kodiraju molekule u digitalnu datoteku poput SMILES-a i PDB-a, te kako se dolazi od analize podataka do kandidata za testiranje.

P3: Korištenje velikih baza podataka – kako funkcioniraju velike baze podataka RCSB PDB i Uniprot, kako s njih skidati, filtrirati i analizirati podatke, te kako koristiti jednostavne Python kodove za API zahtjeve.

P4: Analiza podataka – kako analizirati aminokiselinska kemijska svojstva, frekvenciju aminokiselina, i analiza sekvenci multiple sequence alignment-om.

P5: PyMol vizualizacija i analiza PDB datoteka – osnove stvaranja slika i manipulacija PDB-om, poravnanje strukture uz strukturu, mutacija, mjerenja i kreacija novih objekata. Učiti će se kako implementirati Python pakete u komandnu liniju.

P6: Kreiranje molekula kandidata – kako modelirati aktivno mjesto na bazi proteina, kreirati sekvencu u PyMolu i modificirati ga u Avogadru.

P7: Priprema sustava za GROMACS simulaciju – ubacit ćemo stvorenu molekulu u CHARMM-GUI i pripremiti skripte i MDP datoteke za simulaciju. Pokazat ćemo kako se radi sa superračunalom i kako pokrenuti simulaciju kroz komandnu liniju.

P8: Vizualizacija i analiza simulacije kroz VMD – kako provjeriti je li simulacija ispravno izvršena, kako otvoriti, označiti i manipulirati simulaciju u VMD-u. Analiza će se sastojati od vizualne inspekcije i mjerenja dinamične geometrije aktivnog mjesta.

Seminari:

S1: Priprema sustava za simulaciju

S2: Analiza i vizualizacija simulacije

Vježbe:

V1: Analiza podataka s RCSB PDB, Uniprota i M-CSA-a

V2: PyMol: kreiranje slika, poredavanje i analiza paterna

V3: Priprema molekule kandidata



Obveze, način praćenja i vrednovanje studenata:

Odraditi laboratorijske vježbe, seminare te prisustvovati predavanjima.

Ispitni rokovi:

1. Prvi pismeni ispit će se održati u utorak 30.1.2024.
2. Drugi rok pismenog ispita je 26.2.2024.
3. Treći ispitni rok je u lipnju, prema dogovoru sa studentima

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

Na kolegiju studenti tijekom kontinuirane nastave mogu steći maksimalno 50% ocjenskih bodova (seminari 40%, aktivnost na nastavi 10%), a na završnom ispitu 50%. 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)
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
17.01.2024.	Svi	10-11	O-30	P1	Daniela Kalafatović
17.01.2024.	Svi	11-14	O-30	P1	Daniela Kalafatović
18.01.2024.	Svi	10-13	O-30	P2	Daniela Kalafatović
19.01.2024.	Svi	10-13	O-30	P3	Daniela Kalafatović
22.01.2024	Svi	09-12	O-339	P4	Daniela Kalafatović
22.01.2024	G1	12-14	O-339	V1	Marko Babić
22.01.2024	G2	14-16	O-339	V1	Marko Babić
22.01.2024	G3	16-18	O-339	V1	Marko Babić
23.01.2024	Svi	09-12	O-339	P5	Daniela Kalafatović
23.01.2024	G1	12-14	O-339	V2	Marko Babić
23.01.2024	G2	14-16	O-339	V2	Marko Babić
23.01.2024	G3	16-18	O-339	V2	Marko Babić
24.01.2024	Svi	09-12	O-339	P6	Daniela Kalafatović
24.01.2024	G1	12-14	O-339	V3	Marko Babić
24.01.2024	G2	14-16	O-339	V3	Marko Babić
24.01.2024	G3	16-18	O-339	V3	Marko Babić
25.01.2024	Svi	09-12	O-339	P7	Daniela Kalafatović



25.01.2024	G1	12-16	O-339	S1	Marko Babić
25.01.2024	G2	16-20	O-339	S1	Marko Babić
29.01.2024	Svi	09-12	O-339	P8	Daniela Kalafatović
29.01.2024	G1	12-15	O-339	S2	Marko Babić
29.01.2024	G2	15-18	O-339	S2	Marko Babić
30.01.2024	Svi	14-15		ISPIT	Daniela Kalafatović

Dodatne informacije:

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.