

---

**Detaljni izvedbeni nastavni plan za kolegij:****KEMOINFORMATIKA: STRUKTURA I FUNKCIJA BIOMOLEKULA**

---

**Akadska godina:** 2024/2025**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:** 10P+10S (2 grupe) +10V (3 grupe)

**Preduvjeti za upis kolegija:** Potrebno je imati osnovna znanja iz biokemije, opće kemije, farmakologije, matematike, statistike, fizike i informatike do sada učene na preddiplomskom studiju. Iznimno je bitno da studenti ponove osnovno korištenje računala u slučaju da sa njime nisu dugo radili. Moraju znati koristiti e-mail, MS Office, Internet, i koristiti osnovne funkcionalnosti aktualnih Windows operativnih sustava (Win10 ili 11).

---

**Nositelj kolegija i kontakt podaci:**

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

Adresa: Sveučilište u Rijeci, Fakultet biotehnologije i razvoja lijekova, ured O-810

tel: 051/584-588

e-mail: daniela.kalafatovic@uniri.hr

**Vrijeme konzultacija:** predavač je dostupan na email-u i u uredu, od 8 do 17 od ponedjeljka do petka, uz prethodni dogovor s predavačem.

**Izvođači i nastavna opterećenja:**

Doc. dr. sc. Daniela Kalafatović 10P

Marko Babić 10S

Ena Dražić 10S, 30V

**Obavezna literatura i pripadni programi su slobodno dostupna na:**

- <https://www.click2drug.org/>
- <http://pymol.sourceforge.net/newman/userman.pdf>

3. [https://pymolwiki.org/index.php/Selection\\_Algebra](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/ABCChemoinformatics: :ab: ABC of chemoinformatics \(github.com\)](#)
11. [https://chem.libretexts.org/Courses/Intercollegiate\\_Courses/Cheminformatics](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:**

Ako studenti žele staviti navedene software-e na osobno računalo, mogu ali nisu odgovorni to napraviti. Sav software koji se planira koristiti u svrhu predavanja će biti prethodno instaliran na računalima na kojima će studenti raditi. Software u pitanju jest:

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

**Opis predmeta (sažetak i ciljevi kolegija):**

---

Kolegij se sadrži od teoretskog i praktičnog dijela nastave. Teoretski dio nastave ima za cilj postaviti podlogu za daljnja usvajanja znanja u polju kemoinformatike, dok praktični dio pokušava pomoći studentima usvojiti vještine za samostalnu analizu baza podataka, strukture i funkcije biomolekula, te kako simulirati ponašanje biomolekula u dinamičkom sustavu. Nastava je dizajnirana da komplementira i nadograđuje znanja učena na prethodnim kolegijima.

**Ishodi učenja:**

---

Po završetku kolegija studenti će moći:

1. Analizirati baze podataka biomolekula.
2. Nacrtati molekulu u odgovarajućem računalnom zapisu.
3. Analizirati simulaciju molekularne dinamike

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

---

Predavanje:

- 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.

Seminari:

- S1. Analiza podataka – kako analizirati aminokiselinska kemijska svojstva, frekvenciju aminokiselina, i analiza sekvenci multiple sequence alignment-om.
- S2. 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.
- S3. Kreiranje molekula kandidata – kako modelirati aktivno mjesto na bazi proteina, kreirati sekvencu u PyMolu i modificirati ga u Avogadru.
- S4. 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.
- S5. 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.

Vježbe:

- V1: Analiza podataka s RCSB PDB, Uniprot i M-CSA-a
- V2: PyMol: kreiranje slika, poredavanje i analiza paterna
- V3: Priprema molekule kandidata
- V4: Priprema sustava za simulaciju
- V5: Analiza i vizualizacija simulacije

**Obveze, način praćenja i vrednovanje studenata:**

---

Svaki seminar će sadržavati detaljne upute kako izvršiti zadatak iz vježbi. Vježbe se predaju do 23:59 na Merlin, u obliku PDF datoteke na dan kad su zadani. Prisustva na seminarima su obavezna.

**Ispitni rokovi:**

---

1. Prvi pismeni ispit će se održati u utorak 30.1.2025.
2. Drugi rok pismenog ispita je 26.2.2025.
3. Treći ispitni rok je u lipnju, prema dogovoru sa studentima

**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 zadataka iz vježbi i pismenog ispita. Studenti ne mogu dobiti prolaznu ocjenu ako nisu predali vježbe na vrijeme. Vježbe predstavljaju ocjenske bodove iz kontinuiranog dijela nastave. Seminari nose 40% ocjenskih bodova, aktivnost na nastavi 10%, 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)
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
16.01.2025	Svi	10-14	O-30	P1	Daniela Kalafatović
17.01.2025	G1	11-13	O-339	S1	Ena Dražić
17.01.2025	G2	13-15	O-339	S1	Marko Babić
17.01.2025	G1	15-17	O-339	V1	Ena Dražić
17.01.2025	G2	17-19	O-339	V1	Ena Dražić
17.01.2025	G3	19-21	O-339	V1	Ena Dražić
20.01.2025	G1	09-11	O-339	S2	Marko Babić
20.01.2025	G2	11-13	O-339	S2	Ena Dražić
20.01.2025	G1	13-15	O-339	V2	Ena Dražić
20.01.2025	G2	15-17	O-339	V2	Ena Dražić
20.01.2025	G3	17-19	O-339	V2	Ena Dražić
21.01.2025	Svi	10-13	O-339	P2	Daniela Kalafatović
22.01.2025	Svi	09-12	O-339	P3	Daniela Kalafatović
23.01.2025	G1	09-11	O-339	S3	Marko Babić
23.01.2025	G2	11-13	O-339	S3	Ena Dražić
23.01.2025	G1	13-15	O-339	V3	Ena Dražić
23.01.2025	G2	15-17	O-339	V3	Ena Dražić
23.01.2025	G3	17-19	O-339	V3	Ena Dražić

24.01.2025	G1	09-11	O-339	S4	Marko Babić
24.01.2025	G2	11-13	O-339	S4	Ena Dražić
24.01.2025	G1	13-15	O-339	V4	Ena Dražić
24.01.2025	G2	15-17	O-339	V4	Ena Dražić
24.01.2025	G3	17-19	O-339	V4	Ena Dražić
27.01.2025	G1	09-11	O-339	S5	Marko Babić
27.01.2025	G2	11-13	O-339	S5	Ena Dražić
27.01.2025	G1	13-15	O-339	V5	Ena Dražić
27.01.2025	G2	15-17	O-339	V5	Ena Dražić
27.01.2025	G3	17-19	O-339	V5	Ena Dražić
28.01.2025		14-15		ISPIT	Daniela Kalafatović

**Dodatne informacije:**

---

**Način praćenja kvalitete i uspješnosti izvedbe:**

Predavanja u ovom kolegiju su sastavljena od javno dostupnih informacija preko interneta i priručnicima za korištenje software-a. Sastav predavanja je baziran na temeljito testiranim procedurama vidljivim u literaturi, te u eksperimentalnom radu predavača. Predavanja su koncipirana da budu većinom praktična osiguravajući da dobiveni rezultati su interpretativni i u skladu s prirodnim zakonima ako je protokol ispravno odrađen. Vježbe se odrađuju kolektivno i interaktivna su, a ocjene se baziraju na samostalnom ponavljanju protokola odrađenim pod direktnim uputama predavača.

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.

**Akademski 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.