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

Akadska godina: 2025/2026

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: prof. dr. sc. Milan Mesić

Adresa: Sveučilište u Rijeci, Fakultet biotehnologije i razvoja lijekova, ured O-809

tel: 051/584-565

e-mail: milan.mesic@uniri.hr

Vrijeme konzultacija: predavač je dostupan na email-u i u uredu, od 9 do 17 od ponedjeljka do petka, uz prethodni dogovor s predavačem.

Izvođači i nastavna opterećenja:

prof. dr.sc. Milan Mesić 10P

Prof.dr.sc. Milan Mesić 10S, 30V

Dr. sc. Pegi Pavletić 10S

Obavezna literatura i pripadni programi su slobodno dostupna na:

1. BIOVIA Draw <https://discover.3ds.com/biovia-draw-academic>
2. SciFinder <https://scifinder-n.cas.org/>
3. DataWarrior <https://openmolecules.org/datawarrior/download.html>
4. <https://www.click2drug.org/>
5. <http://pymol.sourceforge.net/newman/userman.pdf>
6. [Open source molecular modeling - ScienceDirect](#)
7. <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) ChemSketch
- 2) DataWarrior
- 3) PyMol
- 4) Avogadro

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, pretraživanje strukture i biološke aktivnosti molekula te interakcije molekula sa biomolekulama. Nastava je dizajnirana da komplementira i nadograđuje znanja učena na prethodnim kolegijima sa fokusom na znanja potrebna u razumijevanju mehanizama djelovanja lijekova kao i dizajnu novih prekliničkih kandidata.

Ishodi učenja:

Po završetku kolegija studenti će moći:

1. Analizirati baze podataka malih molekula i biomolekula.
2. Nacrtati molekulu u odgovarajućem računalnom zapisu i koristiti alate potrebne za računalno asistiranu procjenu svojstava molekula.
3. Naučiti koristiti alate za molekularno uklapanje.

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 alate za pretraživanje kemijskih struktura i biološki aktivnih molekula.

Seminari:

S1. Korištenje alata za kemijsko crtanje, pretvaranje dvodimenzionalnih struktura u 3D, generiranje i analiza SMILES fajlova i unošenje struktura u različite alate u računalno asistiranim metodama dizajna lijekova..

S2. Pretraživanje SciFinder alata u svrhu identifikacije poznatih i nepoznatih struktura i molekula, njihovog načina sinteze ali podataka o biološkom djelovanju. Provjera patentibilnosti novih molekula dizajniranih u projektima.

S3. PyMol vizualizacija i analiza PDB datoteka – osnove stvaranja slika i manipulacija PDB-om, poravnanje strukture uz strukturu, mutacija, mjerenja i kreacija novih objekata.

S4. Kreiranje molekula kandidata – kako modelirati aktivno mjesto na bazi proteina, kreirati sekvencu u PyMolu i modificirati ga u Avogadru ili sličnom odgovarajućem alatu..

Vježbe:

V1: Korištenje alata za crtanje struktura i uvoz/izvoz struktura u različite programe

V2: Pretraživanje struktura i informacija u SciFinder-u

V3: PyMol: kreiranje slika, priprema molekula, analiza ligand – protein veznog mjesta

V4: Generiranje vlastite baze podataka u DataWarrior-u te Generiranje ADME svojstava molekula

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 23.1.2026.
2. Drugi rok pismenog ispita je 26.2.2026.
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
12.01.2026	Svi	11-13	O-268	P1	Milan Mesić
13.01.2026	G1	12-14	O-339	S1	Milan Mesić
13.01.2026	G2	14-16	O-339	S1	Milan Mesić
14.01.2026	G1	12:30-14	O-339	V1	Milan Mesić
14.01.2026	G2	14-15:30	O-339	V1	Milan Mesić
14.01.2026	G3	15:30-17	O-339	V1	Milan Mesić
15.01.2026	G1	12-14	O-339	S2	Milan Mesić
15.01.2026	G2	14-16	O-339	S2	Milan Mesić
16.01.2026	G1	10-12	O-339	V2	Milan Mesić
16.01.2026	G2	12-14	O-339	V2	Milan Mesić
16.01.2026	G3	14-16	O-339	V2	Milan Mesić
19.01.2026	Svi	11-13	O-268	P2	Milan Mesić
20.01.2026	G1	09-11	O-339	S3	Pegi Pavletić
20.01.2026	G2	11-13	O-339	S3	Milan Mesić
21.01.2026	G1	9-11	O-339	V3	Milan Mesić
21.01.2026	G2	11-13	O-339	V3	Milan Mesić
21.01.2026	G3	13-15	O-339	V3	Milan Mesić
22.01.2026	Svi	9-11	O-268	P3	Milan Mesić
22.01.2026	G1	11-13	O-339	S4	Pegi Pavletić

22.01.2026	G2	13-15	O-339	S4	Pegi Pavletić
23.01.2026	Svi	10-12		ISPIT	Milan Mesić

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.

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