
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 opće kemije, organske kemije, biokemije, 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). Također moraju aktivirati svoju licencu za korištenje alata SciFinder koji je internetski alat ali se prije prvog pokretanja mora dobiti korisnički račun.

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 kao 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 (2grupe), 30V (tri grupe)

Dr. sc. Zrinko Baričević 10S (2grupe), 30V (tri grupe)

Obavezna literatura i pripadni programi su slobodno dostupna na:

1. BIOVIA Draw <https://discover.3ds.com/biovia-draw-academic> (preinstalirana aplikacija u računalnoj učionici)
2. Avogadro <https://sourceforge.net/projects/avogadro/files/latest/download> (preinstalirana aplikacija)
3. SciFinder <https://scifinder-n.cas.org/> (web based aplikacija (potrebno ishoditi licencu))
4. DataWarrior <https://openmolecules.org/datawarrior/download.html> (preinstalirana aplikacija u računalnoj učionici)
5. Maestro Elements (Preinstalirana aplikacija u računalnoj učionici)

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).
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

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 kao što je gore navedeno je instaliran na računalima na kojima će studenti raditi. Software u pitanju jest:

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. Nacrtati molekulu u odgovarajućem računalnom zapisu i koristiti alate potrebne za izvoz digitalnog zapisa u druge alate za računalnu kemiju i kemoinformatiku.
2. Koristiti osnovne alate za pretvaranje dvodimenzionalnih struktura (2D) u trodimenzionalne (3D) kao i osnove molekularne dinamike.
3. Koristiti alat za pretraživanje literature i патената te načina sinteze molekula.
4. Povezati odnos strukture i bioloških svojstava molekula uporabom računalno asistirane procjene svojstava molekula.
5. Analizirati baze podataka malih molekula i biomolekula te naučiti kreirati vlastitu bazu s kemijskim informacijama.
6. Naučiti koristiti alate za vizualizaciju proteina kao i osnove molekularnog uklapanja.

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

Predavanje:

- P1. Uvodno predavanje, opis sadržaja i načina na koji je kolegij definiran.
- P2. Uvod u kemoinformatiku – predavanje koje će objasniti što je podatak, što su kemijski orijentirane baze podataka, kako se kodiraju molekule u digitalnu datoteku poput Mol dokumenta, SMILES-a i PDB-a, te kako se dolazi od analize podataka do kandidata za testiranje.
- P3-4. Kako koristiti alate za crtanje 2D molekula i kako molekule unositi u alate za 3D prikaz (Avogadro). Kako koristiti molekularnu mehaniku i što se s njom može dobiti. Što je to semiempirijski račun a što DFT.
- P5. Što je to SciFinder, kako je nastao i kako ga koristiti.
- P6. Kako pretraživati fizikalno kemijska svojstva molekula i kako struktura mijenja osobine molekule.
- P7. Korištenje velikih baza podataka – kako funkcioniraju velike baze podataka PubChem, PDB kako s njih skidati, filtrirati i analizirati podatke, te kako koristiti alate za pretraživanje kemijskih struktura i biološki aktivnih molekula.
- P8-9. Vizualizacija proteina i liganada, međusobnih interakcija, jednostavni primjeri uklapanja novih molekula u aktivno mjesto (Maestro elements i Vinadock)
- P10. Korištenje AI asistencije u kemoinformatici, doseg i pravilno korištenje.

Seminari:

- S1. Korištenje alata za kemijsko crtanje (BioviaDraw), generiranje i analiza SMILES fajlova i unošenje struktura u različite alate u računalno asistiranim metodama dizajna lijekova pretvaranje dvodimenzionalnih struktura u 3D i molekularna mehanika (Avogadro).
- S2. Pretraživanje korištenjem 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. Maestro elements/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, pripremiti

protein za molekulsko uklapanje alatom Maestro elements/PyMolu i provesti jednostavno uklapanje molekule s Vinadock alatom.

Vježbe:

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

V2: Pretraživanje struktura i informacija u SciFinder-u

V3: Maestro Elements: kreiranje slika, priprema molekula, analiza ligand – protein veznog mjesta, molekularno uklapanje.

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 ili u dogovoru s asistentom. Prisustva na seminarima i vježbama 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 ili su kasnili s predajom bez ispričnice. Vježbe predstavljaju ocjenske bodove iz kontinuiranog dijela nastave. Seminari i vježbe 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	11-14	Innova Lab	P1-P3	Milan Mesić
13.01.2026	G1	12-14	O-339	S1	Zrinko Baričević/Milan Mesić
13.01.2026	G2	14-16	O-339	S1	Zrinko Baričević/Milan Mesić
14.01.2026	G1	12:30-14	O-339	V1	Zrinko Baričević/Milan Mesić
14.01.2026	G2	14-15:30	O-339	V1	Zrinko Baričević/Milan Mesić
14.01.2026	G3	15:30-17	O-339	V1	Zrinko Baričević/Milan Mesić
15.01.2026	G1	12-14	O-339	S2	Zrinko Baričević/Milan Mesić
15.01.2026	G2	14-16	O-339	S2	Zrinko Baričević/Milan Mesić
16.01.2026	G1	10-12	O-339	V2	Zrinko Baričević/Milan Mesić
16.01.2026	G2	12-14	O-339	V2	Zrinko Baričević/Milan Mesić
16.01.2026	G3	14-16	O-339	V2	Zrinko Baričević/Milan Mesić
19.01.2026	Svi	11-14	Innova Lab	P4-P7	Milan Mesić
20.01.2026	Svi	10-12	O-030	P8-P10	Milan Mesić
20.01.2026	G1	13-15	O-339	S3	Zrinko Baričević/Milan Mesić
20.01.2026	G2	15-17	O-339	S3	Zrinko Baričević/Milan Mesić
21.01.2026	G1	9-11	O-339	V3	Zrinko Baričević/Milan Mesić
21.01.2026	G2	11-13	O-339	V3	Zrinko Baričević/Milan Mesić
21.01.2026	G3	13-15	O-339	V3	Zrinko Baričević/Milan Mesić
22.01.2026	G1	11-13	O-339	S4	Zrinko Baričević/Milan Mesić

22.01.2026	G2	13-15	O-339	S4	Zrinko Baričević/Milan Mesić
23.01.2026	G1	9-11	O-339	ISPIT	Zrinko Baričević/Milan Mesić
	G2	11-13	O-339		Zrinko Baričević/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.

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