Detaljni izvedbeni nastavni plan za kolegij:

MEDICINSKA KEMIJA

Akademska godina: 2026/2027

Studij: Diplomski studij: Istraživanje i razvoj lijekova. Diplomski studij: Medicinska kemija. Diplomski studij: Biotehnologija u medicini

Kod kolegija: MK202

ECTS bodovi: 6

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

Nastavno opterećenje kolegija: 25P +20S +15V.

Preduvjeti za upis kolegija:

Da bi uspješno pratili kolegij od studenta se očekuje da su tijekom studija uspješno savladali prijašnje kolegije, poimence: opću i organsku kemiju, biokemiju, fizikalnu i analitičku kemiju, bioorgansku kemiju, farmakologiju, matematiku i statistiku, fiziku te kemoinformatiku.

Nositelj kolegija i kontakt podaci:

prof. dr. sc. Milan Mesić
e-mail: milan.mesic@uniri.hr
Vrijeme konzultacija: dostupan sam studentima utorak – četvrtak (po dogovoru sa studentima), 14:00-16:00 h ili e-mailom ponedjeljak-petak 09:00-16:00 h.

Izvođači i nastave, seminara i vježbi:

Predavači: prof. dr. sc. Milan Mesić, izv. prof. dr. sc. Sanja Koštrun, doc. dr. sc. Jasna Padovan, prof. dr. sc. Vesna Eraković Haber, dr.sc. Danijela Barić, Asistent na seminarima i vježbama: dr. Pegi Pavletić

Obavezna literatura:

1. An Introduction to Medicinal Chemistry 7th Edition. Graham Patrick. Paperback: 960 pages. Publisher: Oxford University Press; 7th edition (16 March 2023).

Software potreban za sudjelovanje na predavanjima:

1. Cresset i Schroedinger programski paketi

Software potreban za sudjelovanje na seminarima i vježbama:

1. CAS Scifinder
   Studentima je pristup Scifinderu omogućen preko Eduroam mreže Sveučilišta u Rijeci. Prije početka nastave, potrebno je ulogirati se na stranicu https://scifinder-n.cas.org/ i kreirati profil sa svojim AAI@EduHr podacima.
2. MestReNOVA (pokazno)
   Na vježbu NMR spektroskopije potrebno je donijeti ravnalo.
3. BIOVIA Draw
   Program je dostupan besplatno za akademsku namjenu i može se preuzeti na stranici https://discover.3ds.com/biovia-draw-academic .
4. ChemDraw (pokazno)
5. TargetNET (*http://targetnet.scbdd.com/calcnet/index/*)
6. Rowan Labs (*https://rowansci.com/features/free-pka-calculator*)
7. OSIRIS Property Explorer
   (*https://www.cheminfo.org/flavor/cheminformatics/Utility/Property_explorer/index.html*)
8. ADMETlab 3.0 (*https://admetlab3.scbdd.com*)
9. pkCSM6 (*https://biosig.lab.uq.edu.au/pkcsm/*)
10. ADMET-AI (*https://admet.ai.greenstonebio.com/*)
11. Cheminfo.org- IR Spectra Predictor
    (*https://www.cheminfo.org/flavor/c6h6/cheminformatics/IR_spectra_prediction/index.html*)
12. CFM-ID (*https://cfmid.wishartlab.com/predict*)
13. Protheragen (*https://spectra.collaborationspharma.com/*)

Dodatna literatura:

1. The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action 3rd Edition by Richard B. Silverman Ph.D.
2. Biochemistry Eighth Edition by Jeremy M. Berg, John L. Tymoczko, Gregory J. Gatto Jr., Lubert Stryer.
3. Molecular Modeling Basics 1st Edition by Jan H. Jensen.
4. http://downloads.wavefun.com/FAQ/AGuidetoMM.pdf.
5. http://downloads.wavefun.com/FAQ/Spartan18Manual.pdf.
6. Lehninger Principles of Biochemistry Seventh Edition. David L. Nelson and Michael M. Cox.
7. Textbook of Biochemistry with Clinical Correlations 7th Edition by Thomas M. Devlin. John Wiley & Sons; 7 edition (January 19, 2010).
8. Tutorials in Chemoinformatics, Editor(s):Alexandre Varnek.
9. Directory of computer-aided Drug Design tools: https://www.click2drug.org/.
10. https://svedruziclab.github.io/software.html.

NAPOMENA: tijekom izvođenja predmeta, moguća je upotreba dodatnih izvora, programa ili literature, o kojima će studenti biti obaviješteni od strane nastavnika.

Opis predmeta (sažetak i ciljevi kolegija):

Cilj kolegija je omogućiti polaznicima stjecanje znanja i vještina s kojima će moći samostalno sudjelovati u inovativnim procesima i dizajnu novih potencijalnih lijekova. Studenti će također koristiti računalne analize strukture i funkcije biomolekula. Predavanja će se posebice koncentrirati na optimizaciju novih potencijalnih lijekova koristeći bilo klasičnu analizu eksperimentalnih podataka ili računalne metode kao što su molekularna dinamika te analiza molekularnih interakcija, analiza reaktivnosti molekula, analiza molekularnih modifikacija i molekularne evolucije, te analiza podataka.

Ishodi učenja:

Po završetku kolegija studenti će moći:

1. Razumjeti osnovne pristupe i principe dizajna lijekova i predkliničkih ispitivanja u medicinskoj kemiji.
2. Razumjeti svojstva koja karakteriziraju nove molekule – kandidate za nove lijekove.
3. Analizirati procese koji dovode do optimizacije novih vodećih molekula.
4. Samostalno inovativno rješavati sintetske zadatke korištenjem SciFinder alata za dizajn novih kemijskih entiteta ili njihovu modifikaciju.
5. Samostalno analizirati strukture i funkcije molekula, te molekularne interakcije metodama molekularne dinamike. Studenti će znati prepoznati različite sile i funkcionalne dijelove na molekulama koji kontroliraju dinamičke interakcije unutar molekularnih kompleksa.
6. Samostalno analizirati funkcionalne skupine i reaktivnost molekula metodom kvantne kemije.
7. Samostalno dizajnirati nove lijekove, ili modificirati postojeće lijekove na osnovu identificiranih veznih interakcija, promjena u fleksibilnosti molekula, bioizostera, i farmakofornih grupa.
8. Samostalno pretraživati baze podataka na osnovu farmakofornih skupina.
9. Samostalno analizirati funkcije i strukture velikih biomolekula te dizajnirati nove lijekove na osnovu bioinformatičkih analiza velikih molekula (personalizirana medicina, proteinski inženjering).
10. Samostalno provoditi numeričke analize i optimizacije ravnotežnih i kinetičkih pristupa za izučavanje molekularnih interakcija i enzimatskih mehanizama.

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

1. Predavanja:

P1-P2 Uvodno predavanje. Što je to medicinska kemija, što su lijekovi i koje su metode istraživanja i razvoja novih lijekova. Kratki povijesni pregled medicinske kemije. (MM)

P3-P4. Fizikalno kemijska svojstva lijekova, izvori aktivne molekule, svojstva molekula - potencijalnih lijekova, *in vitro* probir aktivnih molekula. Sinteza novih lijekova i analitičke metode u medicinskoj kemiji. (MM)

P5. Optimizacija vodeće molekule, strukturalne modifikacije, važnost različitih funkcionalnih skupina, fragmentalni pristup dizajnu novih lijekova. (MM)

P6-P7. *In vitro* ADME profiliranje molekula. Farmakokinetika potencijalnih lijekova (JP)

P8-P11. Analiza protein-ligand interakcija, te njihovo predviđanje pomoću metode molekulskog uklapanja. Studenti će naučiti što je konformacijski prostor i kako koristiti ovakve pristupe u dizajnu i procjeni struktura novih lijekova. (SK)

In silico visokoprotočni pristup za istraživanje novih lijekova (*In silico* high throughput screening). Studenti će pretraživati neke od komercijalnih baza spojeva kao bi pronašli ligande koji su *in silico* komplementari ciljnom proteinu. Koristiti će se Cresset i Schroedinger programski paketi. (SK)

Analiza Protein-ligand interakcija. Različiti primjeri iz Protein Data Bank će se koristiti za analize protein- ligand, protein-otapalo i ligand-otapalo interakcija koristit će se za prikaz različitih sila koje reguliraju interakcije među molekulama. (SK)

P12-P13.In vivo farmakologija novih potencijalnih lijekova u predkliničkim ispitivanjima.(VEH)

P14-P15. Kvantna kemija. Studenti će naučiti postavke i podjelu kvantno-mehaničkih (QM) metoda *(ab initio* i DFT, uz osvrt na semiempirijske pristupe), te se upoznati s računima za optimizaciju geometrija i energija molekula i molekulskih sustava. Bit će pokazani računalni postupci za dobivanje plohe elektrostatskog potencijala (uz grafički prikaz rezultata), energija orbitala i interpretaciju rezultata (primjer graničnih orbitala), te računi koji uključuju implicitni utjecaj otapala. Pokazat ćemo metode za koje je dodijeljeno više Nobelovih nagrada za kemiju, s posebnim osvrtom na onu iz 1998: http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1998/ (DB)

P16-P17. Kvantna kemija i biokemija. Studenti će na primjerima malih molekula naučiti interpretirati rezultate QM računa u smislu predviđanja njihove stabilnosti/reaktivnosti te ponašanja u biološkim sustavima. Bit će prikazani primjeri reakcijskih mehanizama u organskoj kemiji i biokemiji (računi za optimizaciju stacionarnih točaka mehanizama). Gledat ćemo unaprijed pripremljene primjere analize enzimskih mehanizama metodama kvantne kemije. Studenti će se upoznati kako dizajnirati kovalentne inhibitore enzima na osnovu stečenih spoznaja o katalitičkom mehanizmu. (DB)

P18-P19. Osnove QSAR metoda. Programi otvorenog koda, sintaksa i uporaba, Python i RDKit. Reprezentacija kemijskih struktura i formati. Rad sa strukturama i računanje deskriptora. Učitavanja struktura i normalizacija. Farmakofori. (ML)

P20-P21. Tipovi deskriptora i tumačenje rezultata. Vizualizacija molekula i pretraživanje podstruktura. Upotreba kemometrike i strojnog učenja u molekulskom modeliranju. Regresijski i klasifikacijski modeli. Tumačenje rezultata modela. P22. Modeliranje ADME svojstava i baze podataka. (ML)

P22-P25. Primjer razvoja modernih peptidnih lijekova za tretiranje dijabetesa i prekomjerne težine. Priprema za završni ispit. (MM)

2. **Seminari:**

S1-S2. Upoznavanje sa sadržajem seminara, opis aktivnosti po seminarima, podjela studenata u grupe. Ispit predznanja iz kemije i ponavljanje gradiva potrebnog za praćenje seminarskog dijela nastave.

S3-S5. Uvod u spektroskopske metode i njihovu primjenu u dizajnu lijekova. Otkriće i uloga NMR spektroskopije u analizi kemijskih spojeva i otkriću strukture nepoznatih spojeva.

S6. Sadržaj seminara nastavlja se na predavanje doc. dr. sc. Jasne Padovan.

S7. Sadržaj seminara nastavlja se na predavanje izv. prof. dr. sc. Sanje Koštrun.

S8-S9. Uloga masene spektrometrije, spektrofotometrije u UV i vidljivom području, te infracrvene spektroskopije u analizi kemijskih spojeva.

S10-S13. Mete lijekova.

S14-S15. Optimizacija kemijskih interakcija lijekova.

S16. Sadržaj seminara nastavlja se na predavanje dr.sc. Danijele Barić.

S17-S20. Praktični primjeri optimizacije kemijskih interakcija lijekova.

3. **Vježbe:**

V1-V2. Praktični primjeri NMR spektroskopije s teoretskim predviđanjem spektara i analizom primjera dostupnih, već kvantificiranih spektara.

V3-V5. Upotreba 2D alata za prikaz molekulskih struktura i predviđanje NMR spektara; te analiza NMR spektara upotrebom MestreNova softwarea. Korištenje dostupnih online programa za predikciju MS, IR i UV/VIS spektara spojeva i analiza primjera spektara za nepoznate spojeve.

V6-V8. Rad s alatima za analizu druglike svojstava lijekova.

V9-V10. Rad s alatima za analizu ADMET svojstava lijekova.

V11-V14. Case study grupni zadatak s primjenom znanja i alata obrađenih/korištenih na seminarima i prethodnim vježbama.

V15. Modeliranje, QSAR, Farmakofori, ADME svojstva.

Ispitni rokovi:

Prvi pismeni ispit (može se održati i elektroničkim putem, upotrebom Merlin sustava) će se održati 22. prosinca 2026. Drugi i ostali ispitni rokovi će se održati po dogovoru sa studentima. Pritom će drugi ispitni rok biti organiziran najmanje 14, a najviše 30 dana nakon prvog ispitnog roka, sukladno čl. 26 Pravilnika o studijima i studiranju na Sveučilištu u Rijeci. Drugi i sljedeći ispitni rokovi ne moraju biti održani u pismenom obliku.

Prijava ispitnog roka podnosi se putem informacijskog sustava evidencije studenata (ISVU), najkasnije do dva dana prije ispitnog termina, a iznimno i kraće, do 60 minuta prije početka ispita, uz prethodnu najavu nastavniku putem e-maila. Ispitu nije moguće pristupiti ukoliko isti nije prijavljen ili ukoliko nastavnik nije putem e-maila potvrdio mogućnost sudjelovanja na ispitnom roku.

Student može završni ispit polagati najviše tri puta u jednoj akademskoj godini.

Obveze, način praćenja i vrednovanje studenata:

Studenti su obavezni prisustvovati svim predavanjima, seminarima i vježbama, isključivo u grupama u koje su raspoređeni. Ukoliko studenti izostanu s nastave (predavanja, seminara ili vježbi) koja uključuje praktičnu izvedbu sadržaja (npr. vježba, ispit, zadatak), studenti su dužni navedenu nastavu nadoknaditi, u dogovoru s nastavnikom. Jedan termin nadoknada će biti organiziran za sve studente. Vježbu koja uključuje Case study zadatak nije moguće nadoknaditi.

Zadaće seminara i vježbi koje zadaju nastavnici-vanjski suradnici su obavezni i predaju se izravno vanjskim suradnicima, s voditeljem seminara u kopiji e-maila. Bodovi iz domaćih zadaća vanjskih suradnika će biti dodijeljeni od strane voditelja seminara, na temelju povratne informacije od vanjskih suradnika o uspješno riješenom zadatku.

Formiranje ocjene (prema Pravilniku o studijima i studiranju na Sveučilištu u Rijeci):

Kontinuirani dio nastave će se ispitati kolokvijem koji nosi do 30.0 % ocjenskih bodova. Izvođenje praktičnog djela seminara i vježbi se boduje s ukupno 20.0 % ocjenskih bodova. Završni pismeni ispit donosi do 50.0 % ocjenskih bodova.

Studenti koji su tijekom kontinuiranog dijela nastave ostvarili:

- od 0 do 24,9 % ukupnih ocjenskih bodova na predmetu- ne mogu pristupiti završnom ispitu;
- više od 25.0 % ocjenskih bodova na predmetu- mogu pristupiti završnom ispitu.

Student mora ostvariti minimalno 50.0 % od ocjenskih bodova na ispitu, kako bi ostvario ECTS bodove kolegija. Svi ostvareni bodovi zaokružuju se na jednu decimalu.

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

% 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:

	Predavanja		Ispiti

Datum	Sati	Vrijeme	Mjesto	Oblik nastave	Izvođač
30.11.2026.	2	12:00-13:30	O-339	P1-P2	Milan Mesić
30.11.2026.	2	14:15-15:45	O-399	S1-S2	Pegi Pavletić

01.12.2026.	2	11:00-12:30	O-030	P3-P4	Milan Mesić
01.12.2026.	3	12:45-15:10	O-339	S3-S5	Pegi Pavletić
02.12.2026.	1	10:00-10:45	O-030	P5	Milan Mesić
02.12.2026.	2	11:00-12:35	O-339	S8-S9	Pegi Pavletić
03.12.2026.	4	12:00-16:00	O-030	P8-P11 S7	Sanja Koštrun
04.12.2026.	4	10:00-13:00	O-030	P6-P7 S6	Jasna Padovan
07.12.2026.	2	09:00-10:35	O-339	V1-V2	Pegi Pavletić
07.12.2026	3	10:40-13:05	O-339	S10-S13	Pegi Pavletić
08.12.2026.	2	10:00-11:35	O-030	P12-P13	Vesna Eraković Haber
08.12.2026.	2	11:40-13:10	O-030	S14-S15	Pegi Pavletić
09.12.2026.	3	08:00-10:25	O-339	V3-V5	Pegi Pavletić
09.12.2026.	4	10:30-13:45	O-339	S17-S20	Pegi Pavletić
10.12.2026.	5	09:00-13:00	O-339	V6-V8 V9-V10	Pegi Pavletić
14.12.2026.	1	14:30-15:30	O-339	Kolokvij-G1	Milan Mesić
14.12.2026	1	15:30-16:30	O-339	Kolokvij-G2	Milan Mesić
16.12.2026.	5	10:00-14:05	O-030	P14-P17 S16	Danijela Barić
17.12.2026.	5	10:00-14:05	O-030	P18-P21 V15	Milan Mesić
18.12.2026.	4	11:00-14:00	O-030	P22-P25	Milan Mesić
21.12.2026.	4	12:00-15:15	O-030	V11-V14	Pegi Pavletić
22.12.2026.	1	13:30-14:45	O-339	Završni ispit-G2	Pegi Pavletić
22.12.2026.	1	14:45-16:00	O-339	Završni ispit-G1	Pegi Pavletić

Nadoknada za propušteni seminar/vježbu (osim V11-V14) će se održati 18.12.2026.g. od 13:30 do 16:00 sati, u učionici O-339.

Dodatne informacije:

Način praćenja kvalitete i uspješnosti izvedbe:

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.

Akademska 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.

Studenti se također moraju strogo pridržavati Politike korištenja alata umjetne inteligencije na Sveučilištu u Rijeci, s posebnim naglaskom na temeljna načela korištenja alata UI, opisana u dokumentu.

Sav tekstualni sadržaj predan od strane studenata biti će pregledan na upotrebu generativne umjetne inteligencije (GenAI), pomoću dostupnih alata (primjerice GPTZero i ZeroGPT). Ukoliko je postotak moguće primjene GenAI veći od 30%, nastavnici imaju pravo studenta usmeno ispitati predani sadržaja.

Kalendar predmeta:

Studentima je za preuzimanje dostupan Outlook kalendar s rasporedom predmeta, koji se može povezati sa uniri e-mailom. Datoteku s rasporedom moguće je preuzeti putem QR koda, a aktivira se na jedan od sljedećih načina:

- Za korisnike s Outlook Desktop aplikacijom: dovoljno je samo preuzetu datoteku povući na kalendar, pri čemu se ona otvara i može spremiti pod vlastiti kalendar ili dijeljeni kalendar.
- Za korisnike koji Outlooku pristupaju iz web browsera: Otići na Outlook Kalendar i kliknuti na opciju „Add calendar“ koja se nalazi u izborniku lijevo. U novootvorenom prozoru, odabrati „Upload from file“ i odabrati preuzetu datoteku. U izborniku koji se otvara niže, odabrati glavni kalendar („Calendar“) i potvrditi klikom na gumb „Add to calendar“.

U datoteci su navedena sva predavanja, vježbe, seminari i ispiti, s popisom učionica.



Radmile Matejčić 2, HR-51 000 Rijeka
IBAN: HR5324020061100977786

ured@biotech.uniri.hr
www. biotech.uniri.hr

T: +385 51 584 550
OIB: 64218323816