Detaljni izvedbeni nastavni plan za kolegij:

KEMOINFORMATIKA: STRUKTURA I FUNKCIJA BIOMOLEKULA

Akademska godina: 2026/2027

Studij: Preddiplomski sveučilišni studij "Biotehnologija i istraživanje lijekova"

Kod kolegija: BIL307

ECTS bodovi: 3

Jezik na kojem se izvodi kolegij: predavanja: hrvatski

Nastavno opterećenje kolegija: 10P+10S (2 grupe) +10V (3 grupe)

Preduvjeti za upis kolegija: Upis kolegija nije ograničen na položene ispite odslušanih kolegija u preddiplomskom studiju ali se očekuje solidna razina usvojenih osnovnih znanja iz matematike, statistike, fizike, opće kemije, organske kemije, biokemije, farmakologije i informatike. 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 i naprednije verzije). Također moraju aktivirati svoju licencu za korištenje alata SciFinder koji je internetski alat ali se prije prvog pokretanja mora dobiti korisnički račun. Korištenje AI je dopušteno i preporučuje se u fazi učenja, vježbi kao i kod samog ispita.

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 osim u vrijeme seminara i vježbi.

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 u računalnoj učionici)
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. Discovery Studio https://discover.3ds.com/discovery-studio-visualizer-download. (preinstalirana aplikacija u računalnoj učionici)
6. Maestro Elements (Preinstalirana aplikacija u računalnoj učionici) (opcionalno)

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

Sve aplikacije koji se planiraju koristiti u svrhu predavanja kao što je gore navedeno je instalirane su na računalima na kojima će studenti raditi.

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 predklinički 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 patenata 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:

Kako bi svi studenti mogli pratiti seminare i sudjelovati aktivno u njima biti će podjeljeni u dvije grupe G1 i G2. Svaka grupa će održavanje seminara imati u drugo vrijeme u učionici O-339.

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 Discovery Studio, OpenBabel i provesti jednostavno uklapanje molekule s Vinadock alatom te vizualizacija najbolje uklopljenih struktura i interakcija molekule s proteinom.

Vježbe:

Kako bi svi studenti mogli pratiti seminare i sudjelovati aktivno u njima biti će podijeljeni u tri grupe G1, G2 i G3. Svaka grupa će održavanje seminara imati u drugo vrijeme u učionici O-339.

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

V2: Pretraživanje struktura i informacija u SciFinder-u

V3: Discovery Studio: 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:

Ispit će se provoditi korištenjem platforme Merlin. Studenti će tijekom ispita moći izlaziti iz platforme kako bi koristili sve raspoložive alate ali i AI u rješavanju zadatka.

Studenti će biti podijeljeni u dvije grupe G1 i G2 i ispitu će pristupiti jedna za drugom. Na ispitu se neće moći koristiti mobilni uređaji i drugi načini komunikacije (e-mail) no biti će slobodno korištenje AI na računalu koje student bude odabrao prilikom ispita. Posebno će se voditi računa da studenti samostalno rješavaju svoj ispit i svako kršenje pravila, komunikacija s drugim studentima ili bilo kojom trećom osobom rezultirati će isključenjem s ispita.

1. Prvi pismeni ispit će se održati u utorak 25.1.2026.

2. . Drugi i 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 zbroja bodova rezultata zadataka iz vježbi i pismenog ispita te sudjelovanja na nastavi. Studenti ne mogu dobiti prolaznu ocjenu ako nisu predali vježbe ili nisu nadoknadili izgubljene vježbe u slučaju izostanka s ispričnicom. 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
12.01.2027	Svi	15-17	O-030	P1-P3	Milan Mesić

13.01.2027	G1	10-12	O-339	S1	Zrinko Baričević/Milan Mesić
13.01.2027	G2	13-15	O-339	S1	Zrinko Baričević/Milan Mesić
14.01.2027	G1	10-12	O-339	V1	Zrinko Baričević/Milan Mesić
14.01.2027	G2	12-14-	O-339	V1	Zrinko Baričević/Milan Mesić
14.01.2027	G3	14-16	O-339	V1	Zrinko Baričević/Milan Mesić
15.01.2027	G1	10-12	O-339	S2	Zrinko Baričević/Milan Mesić
15.01.2027	G2	12-14	O-339	S2	Zrinko Baričević/Milan Mesić
18.01.2027	G1	10-12	O-339	V2	Zrinko Baričević/Milan Mesić
18.01.2027	G2	12-14	O-339	V2	Zrinko Baričević/Milan Mesić
18.01.2027	G3	14-16	O-339	V2	Zrinko Baričević/Milan Mesić
19.01.2026	Svi	13-16	O-030	P4-P7	Milan Mesić
20.01.2027	Svi	10-12	O-030	P8-P10	Milan Mesić
20.01.2027	G1	13-15	O-339	S3	Zrinko Baričević/Milan Mesić
20.01.2027	G2	15-17	O-339	S3	Zrinko Baričević/Milan Mesić
21.01.2027	G1	9-11	O-339	V3	Zrinko Baričević/Milan Mesić
21.01.2027	G2	11-13	O-339	V3	Zrinko Baričević/Milan Mesić
21.01.2027	G3	13-15	O-339	V3	Zrinko Baričević/Milan Mesić
22.01.2027	G1	10-12	O-339	S4	Zrinko Baričević/Milan Mesić
22.01.2027	G2	13-15	O-339	S4	Zrinko Baričević/Milan Mesić
25.01.2027	G1	11-12	O-339	ISPIT	Zrinko Baričević/Milan Mesić
25.01.2027	G2	12-13	O-339	ISPIT	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 programskih alata. 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 studenti razumije korištenje alata, baza i kemoinformatike u cijelosti. Vježbe se odrađuju kolektivno i interaktivne su, a ocjene se baziraju na samostalnom ponavljanju protokola odrađenim pod direktnim uputama predavača i asistenta.

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 iz kolegija. Pitanja ili razgovori bilo kojeg oblika