

Табела 5.2 Спецификација предмета

Студијски програм: ОБХ			
Назив предмета: ХЕМОИНФОРМАТИКА		Шифра:	ИБ-606
Наставник: др Милош М. Свирчев, доцент			
Статус предмета: Изборни			
Број ЕСПБ: 6			
Услов:			
Циљ предмета Упознавање студента са основним елементима хемоинформатике као и са појединим алатима неопходним за бављење овом хемијском дисциплином.			
Исход предмета Након успешног завршетка курса, студент је у стању да опише и примени основне хемоинформатичке методе и способан је да примени одређене информатичке алате у циљу решавања широког спектра хемијских проблема.			
Садржај предмета <i>Теоријска настава</i> Визуализација хемијских структура (2D, 3D). Поређење хемијских структура. Прорачун физичко-хемијских особина једињења. Структурни дескриптори. Базе података. НТРС. Компјутерски дизајн лекова. Компјутерска анализа спектра. Молекулско моделовање. (Q)SAR. Компјутери у стереохемији. <i>Практична настава</i> Увођење студента у рад са софтвером за визуализацију хемијских структура, као и алатима за њихово превођење из 2D у 3D. Упознавање разних формата молекулских података. Поређење једињења на основу структуре као и прорачунатих физичко-хемијских особина. Методе анализе података и њихова примена у компјутерском дизајну лекова, анализи спектра и молекулском моделовању. Предвиђање реактивности молекула од потенцијалног биолошког значаја на основу њихове структуре.			
Литература 1. Попсавин, В. и Свирчев, М. <i>Хемоинформатика</i> , интерна скрипта (доступна на ePMF порталу) <i>Помоћна литература</i> 2. Wegner, J. K.; Sterling, A.; Guha, R.; Bender, A.; Faulon, J.-L.; Hastings, J.; O'Boyle, N.; Overington, J.; Van Vlijmen, H.; Willighagen, E. <i>Commun. ACM</i> 2012 , <i>55</i> , 65–75. 3. Chen, W. L. J. <i>Chem. Inf. Model.</i> 2006 , <i>46</i> , 2230–2255. 4. Leach, A. R.; Gillet, V. J. <i>An Introduction to Chemoinformatics</i> ; 2nd ed.; Springer, 2007. 5. Gasteiger, J.; Engel, T., Eds.; <i>Chemoinformatics: A Textbook</i> ; 1st ed.; Wiley, 2003. 6. Bunin, V. A.; Siesel, B.; Morales, G.; Bajorath, J. <i>Chemoinformatics: Theory, Practice, & Products</i> ; 1st ed.; Springer, 2007.			
Број часова активне наставе 5 (75)	Теоријска настава: 3 (45)	Практична настава: 2 (30)	
Методе извођења наставе Предавања, компјутерске вежбе и консултације.			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
активност у току предавања	10	усмени испит	60
практична настава	20		
семинарски рад	10		