

Студијски програм : Биоинформатика			
Назив предмета: Молекуларно моделовање			
Наставник/наставници: Стеван Армаковић			
Статус предмета: изборни			
Број ЕСПБ: 5			
Услов: нема			
Циљ предмета			
Примарни циљ предмета је да се студенти упознају са основним елементима молекулског моделовања, да науче како молекулско моделовање може да им буде од користи у истраживању, да буду оспособљени да самостално користе одабране компјутерске алате за прорачуне на молекулима, као и да самостално интерпретирају добијене резултате.			
Исход предмета			
Након одслушаног курса студенти ће бити у стању да самостално:			
<ul style="list-style-type: none"> • користе одабране компјутерске алате за прорачуне на молекулима • одаберу адекватан ниво теорије за атомистичке прорачуне на различитим молекулским структурама • интерпретирају основне резултате добијене прорачунима на молекулима • анализирају одређене резултате научних радова где се примењује молекулско моделовање 			
Садржај предмета			
<i>Теоријска настава</i>			
Основни елементи моделовања (геометријска оптимизација, вибрациона анализа, основна и прелазна стања). Нивои теорије (молекулска механика и потенцијал сила, квантно-механички методи, полуемпиријски методи, симулације молекулске динамике, молекулски докинг, хибридни прорачуни). Класични и квантно-молекулски дескриптори. Симулације спектра (ИЦ, УВ, НМР и Раман). Параметри сличности лека. Интеракције молекула. Квантитативни односи између структуре и активности.			
<i>Практична настава</i>			
Визуелизација молекулских структура. Генерисање и учитавање модела молекулских структура у програме за моделовање. Алати за генерисање улазних и анализу излазних фајлова. Основни прорачуни на молекулима (укупна енергија молекула, геометријска оптимизација и идентификација основног и прелазног стања, вибрациона анализа). Одабир нивоа теорије и подешавање основних параметара прорачуна/симулација. Рачунање и анализа класичних и квантно-механичких дескриптора стабилности и реактивности. Симулације одабраних спектра. Интеракције међу молекулима (енергија активације и енергија везивања). Симулације молекулске динамике.			
Литература			
<ol style="list-style-type: none"> 1. Molecular Modeling Basics – Jan Jensen (CRC Press, Taylor and Francis Group) 2. Molecular Modeling Techniques in Material Sciences - Jörg-Rüdiger Hill, Lalitha Subramanian, Amitesh Maiti 3. Osnovi molekuskog modelovanja – Stevan Armaković 			
Број часова активне наставе	Теоријска настава: 2	Практична настава: 2	
Методe извођења наставе			
Предавања, практичне вежбе уз примену компјутера			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
активност у току предавања	5	писмени испит	40
практична настава	20	усмени испит	15
колоквијум-и		
семинарски рад	20		
Начин провере знања могу бити различити наведено у табели су само неке опције: (писмени испити, усмени испит, презентација пројекта, семинари итд.....			
*максимална дужна 2 странице А4 формата			