

<b>Студијски програм : Биоинформатика</b>			
<b>Назив предмета: Молекуларна информатика</b>			
<b>Наставник/наставници: др Едвард Петри</b>			
<b>Статус предмета: изборни</b>			
<b>Број ЕСПБ: 6</b>			
<b>Услов:</b>			
<b>Циљ предмета</b>			
<p>На предмету Молекуларна информатика студенти ће стећи неопходна теоријска знања и практично искуство у коришћењу и оптимизацији алата и метода биоинформатике и хеминформатике за предвиђање, анализу и моделовање протеин-протеин, протеин-лиганд и протеин-ДНК интеракција. Студенти ће користити методе структурне биоинформатике за моделовање структурних основа биолошких функција. Студенти ће научити да користе биоинформатичке методе за виртуелни скрининг, за идентификацију биоактивних једињења и методе за предвиђање и анализу интеракција између природних, ендогених или синтетичких/ксенобиотских једињења и протеина. Студенти ће стећи практично искуство у дизајну лекова и других биоактивних једињења на основу структуре протеина, и упознати се са рачунарским методама које се користе за моделовање механизма деловања нових или постојећих лекова. Од посебног значаја је и то што ће студенти научити одговарајуће методе за валидацију резултата добијених коришћењем биоинформатичких метода, као и резултата виртуелног скрининга и моделовања.</p>			
<b>Исход предмета</b>			
<p>Након успешно реализованих предиспитних и испитних обавеза студенти ће моћи да: користе и оптимизују програме и алата структурне биоинформатике за анализу и предвиђање биомолекуларних интеракција; програме за виртуелни скрининг и идентификацију биоактивних једињења; дизајнирају биоактивна једињења на основу структуре протеина; изврше валидацију резултата добијених коришћењем биоинформатичких метода; визуелно прикажу и анализирају макромолекуле и друге биомолекуле.</p>			
<b>Садржај предмета</b>			
<i>Теоријска настава</i>			
<p>Теоријска настава ће бити вођена практичном наставом. Теоријско разумевање биоинформатичких алата, програма и метода које ћемо користити током семестра. Теоријско разумевање алата и метода биоинформатике и хеминформатике за предвиђање, анализу и моделовање интеракција протеин-протеин, протеин-лиганд и протеин-ДНК. Структурне основе биомолекуларних интеракција.</p>			
<i>Практична настава</i>			
<p>Практична настава биће организована у виду рачунарских вежби, усаглашених са теоријским програмом курса што ће омогућити студентима да савладају коришћење биоинформатичких метода као и програма за тродимензионалну макромолекуларну визуелизацију и анализу. Биоинформатичке методе за предвиђање, анализу и моделовање интеракција протеин-протеин, протеин-лиганд и протеин-ДНК, укључујући молекуларно спајање (<i>eng. molecular docking</i>). Коришћење база података које садрже структурне и функционалне информације за протеине и биоактивна једињења. Употреба виртуелног скрининга за идентификацију и рангирање биоактивних једињења. Дизајн лекова на основу структуре протеина. Методе за валидацију резултата добијених коришћењем биоинформатичких метода, као и резултата виртуелног скрининга и моделовања биомолекулске интеракције. Коришћење програма за визуелизацију и анализу биомолекуларних интеракција и анализу структурних основа функције протеина</p>			
<b>Литература</b>			
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Structural Bioinformatics: Methods and Protocols. Springer publishing, 2020. ISBN: 978-1-0716-0270-6.</li> <li>2. Bioinformatics, 4th Edition. Andreas D. Baxevanis (Editor), Gary D. Bader (Editor), David S. Wishart (Editor). ISBN: 978-1-119-33558-0 April 2020.</li> <li>2. Structural Bioinformatics 2nd Ed. Philip E. Bourne (Editor), Jenny Gu (Editor). Wiley-Blackwell; 2nd edition, 2010. ISBN-10 : 0470181052.</li> <li>3. Computational and Structural Approaches to Drug Discovery: Ligand-Protein Interactions. Robert M. Stroud and Janet Finer-Moore. RSC Biomolecular Sciences. RSC Publishing.</li> <li>4. Protein Bioinformatics: From Sequence to Function. M. Michael Gromiha. Academic Press. 2010. ISBN-13: 978-8131222973</li> </ol>			
<b>Број часова активне наставе</b>	<b>Теоријска настава: 2</b>	<b>Практична настава: 2</b>	
<b>Методе извођења наставе</b> Предавања, рачунарске вежбе, семинарски рад и консултације.			
<b>Оцена знања (максимални број поена 100)</b>			
<b>Предиспитне обавезе</b>	поена <b>60</b>	<b>Завршни испит</b>	поена
активност у току предавања		писмени испит	30
практична настава	<b>20</b>	усмени испит	10
колоквијум-и	<b>20</b>	.....	
семинар-и	<b>20</b>		