

Табела 5.2. Спецификација предмета

Студијски програм: МАС Биохемија			
Назив предмета: Хемоинформатика			Шифра: MB110
Наставник: Милош Свирчев			
Статус предмета: изборни			
Број ЕСПБ: 6			
Услов: -			
Циљ предмета: Упознавање студената 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 направи одређене информатичке алате (скрипте) у циљу решавања широког спектра хемијских проблема.			
Садржај предмета Теоријска настава: Визуализација хемијских структура (2D, 3D). Поређење хемијских структура. Прорачун физичко-хемијских особина једињења. SMILES. Дескриптори и сличност молекула у хемоинформатици. Базе података. HTTPS. Компјутерски дизајн лекова. Основе молекулског моделовања и QSAR. Основе Python-a. Практична настава: Увођење студента у рад са софтвером за визуелизацију 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 и молекулском моделовању. Прављење једноставних скрипти у Python-у. Грађење QSAR модела из скупа молекула.			
Литература: 1. Попсавин, В. и Свирчев, М. <i>Хемоинформатика</i> , интерна скрипта (доступна на ePMF порталу) Помоћна литература 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, 55, 65–75. 3. Chen, W. L. J. <i>Chem. Inf. Model.</i> 2006, 46, 2230–2255. 4. Leach, A. R.; Gillet, V. J. <i>An Introduction to Chemoinformatics</i> ; 2 nd ed.; Springer, 2007. 5. Gasteiger, J.; Engel, T., Eds.; <i>Chemoinformatics: A Textbook</i> ; 1st ed.; Wiley, 2003. 6. Bunin, B. A.; Siesel, B.; Morales, G.; Bajorath, J. <i>Chemoinformatics: Theory, Practice, & Products</i> ; 1st ed.; Springer, 2007.			
Број часова активне наставе: 4 (60)		Теоријска настава: 2 (30)	
		Практична настава: 2 (30)	
Методе извођења наставе: Предавања, компјутерске вежбе и симулације, консултације.			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе		поена	Завршни испит
активност у току предавања		5	писмени испит
практична настава		10	усмени испит
семинарски рад		25	