

Табела 5.2. Спецификација предмета

Студијски програм: Мастер академске студије Физичка хемија
Назив предмета: Информационе технологије у биофизичкој хемији
Наставници: Мојовић Милош, Поповић Бијелић Ана
Статус предмета: Изборни
Број ЕСПБ: 7
Услов: Нема
<p>Циљ предмета</p> <p>Циљ предмета је да студент прошири своје знање из области примене рачунара на пољу истраживања из области биофизичке хемије, специфично из области структуре и функције биомолекула, биолошких и вештачких мембрана, дизајна лекова, испоруке лекова, фармакокинетице, као и принципима спектроскопских метода за проучавање биосистема.</p>
<p>Исход предмета</p> <p>Студент је стекао знање да идентификује научна питања из области биофизике хемије на која није могуће одговорити коришћењем само експерименталних техника већ захтевају коришћење информационих технологија (ИТ). Студент је оспособљен да самостално направи програм за анализу фармакокинетице дистрибуције лекова. Студент је оспособљен да самостално направи адекватан програм за симулацију базираном на неуронској мрежи. Студент је оспособљен да изврши виртуелни скрининг доступних база хемијских једињења као потенцијалних лекова са циљем предвиђања ефикасности одређеног лека у терапији. Студент је оспособљен да рачунарски манипулише ДНК секвенцама добијених из међународно доступних база података. Студент зна да користи методе рачунарске хемије за испитивање и дизајн лекова (теорија функционала густине, молекулска динамика и молекулски докинг). Студент влада софтвером за анализу 2Д и 3Д слика магнетне резонаније. Студент влада софтвером за симулацију ЕПР спектра. Студент зна да комбинује методу неуронских мрежа и методу анализе главних компонената у циљу обраде сложених спектроскопских података.</p>
<p>Садржај предмета</p> <p><i>Теоријска настава</i></p> <p>Структура и функција биомолекула, биолошких и вештачких мембрана, дизајн лекова, испорука лекова, фармакокинетика, принципи спектроскопских метода за проучавање биосистема. Теоријске основе синтезе носача активних супстанција намењених за испоруку различитим рутама у зависности од указане потребе. Креирање програма за анализу фармакокинетице дистрибуције лекова. Креирање програма за симулацију неуронске мреже. Виртуелни скрининг доступних база хемијских једињења као потенцијалних лекова са циљем предвиђања ефикасности одређеног лека у терапији. Рачунарска манипулација ДНК секвенцама добијених из међународно доступних база података. Креирање програма за анализу података методом главних и независних компонената. Рад у софтверским пакетима за испитивање и дизајн лекова (теорија функционала густине, молекулски докинг и молекулска динамика). Теоријске основе и рад у програмима за сумулације ЕПР спектра. Примена софтвера за анализу 2Д и 3Д слика добијених мерењем методама електронске и нуклеарне магнетне резонантне спектроскопије (ЕПРИ и МРИ) у циљу праћења дистрибуције лекова. Примена комбиноване методе неуронских мрежа и анализе главних компонената у циљу деконволуције сложених експериментално добијених спектра добијених спектроскопским методама којима ће се пратити дистрибуција лекова.</p> <p><i>Практична настава</i></p> <p><u>Рад за рачунаром:</u> Напредно програмирање у програму <i>MATLAB</i> - примена за решавање научних питања из области биофизичке хемије, биологије, медицине и фармације (прављење софтвера за анализу фармакокинетичких модела, прављење софтвера различитих модела неуронских мрежа, рачунарска манипулација ДНК секвенцама и претрага расположивих база података). Рад у софтверу за анализу главних и независних компонената. Рад у софтверу за анализу слике добијене техникама магнетне резонаније (ЕПРИ и МРИ). Креирање модела лека (<i>MOLDEN, Avogadro</i>) и његово испитивање у програмима за молекулски докинг. Виртуелни скрининг доступних база података хемијских једињења као потенцијалних лекова са циљем предвиђања места везивања за одређени биомолекул. Предвиђање интеракција лека са слободним радикалима применом теорије функционала густине. Анализа везе структуре и активности малих молекула. Визуализација и карактеризација протеин-протеин и протеин-лиганд интеракција.</p> <p><u>Рад у лабораторији:</u> Примена знања из програмирања у конкретном експерименту. Прављење споја између експерименталног и ИТ знања. Синтеза система за испоруку антиоксиданаса и експериментално одређивање њихове ефикасности за уклањање слободних радикала.</p>

Литература

1. Милош Мојовић, Рачунарство и информатика за студенте физичке хемије са применама у биофизичкој хемији, Факултет за физичку хемију (2020).
2. E. E. Mikhailov, Programming with MATLAB for scientists: A beginner's introduction, CRC Press - Taylor & Francis Group (2017).
3. Oren M. Becker, Alexander D. MacKerell Jr., Benot Roux, Masakatsu Watanabe, Computational biochemistry and biophysics, Marcel Dekker (2001).
4. C. Stan Tsai, An introduction to computational biochemistry, John Wiley & Sons (2002).
5. Barry L. Stoddard, Computational design of ligand binding proteins, Humana Press (2016).

Број часова активне наставе**Теоријска настава: 2****Практична настава: 4****Методe извођења наставе**

Интерактивна предавања уз коришћење рачунара.

Оцена знања (максимални број поена 100)

Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
активност у току предавања	10	писмени испит	20
практична настава	20	усмени испит	30
колоквијум-и			
семинар-и	20		