

Студијски програм: Интегрисане академске студије - Фармација			
Назив предмета: Хемоинформатика			
Наставник/наставници: проф. др Александар Веселиновић			
Статус предмета: Изборни			
Број ЕСПБ: 2			
Шифра предмета: Ф33803			
Услов: /			
Циљ предмета			
<p>Стицање знања из области хемоинформатике са применом <i>in silico</i> метода у области фармације. Упознавање са компјутерским програмима који служе за моделовање хемијских структура и квантитативног односа структуре и активности, одређивање фармакофора и молекуларни докинг. Усвајање знања потребног за идентификацију значајних молекулских фрагмената који имају утицај на испитиване активности. Стицање знања за критички компјутерски дизајн лекова.</p>			
Исход предмета			
<p>После положеног испита од студента се очекује да: познаје основне математичке и информатичке моделе који имају примену у хемоинформатици, самостално креира молекулске базе података, развије и анализира квантитативне односе структуре и фармаколошке активности молекула, идентификује фармакофоре и молекулске фрагменте, примени добијене компјутерске моделе на већ постојеће <i>on line</i> молекулске базе података, примени молекулско моделовање, примени добијене резултате из хемоинформатичких метода на компјутерски дизајн молекула.</p>			
Садржај предмета			
<i>Теоријска настава</i>			
<p>Теоријска разматрања хемонформатике: компјутерски програми за моделовање хемијских структура, молекулски дескриптори, теорија молекулског графа и молекулска топологија, молекулски „отисак прста“ и SMILES код, успостављање квантитативних односа структуре, особина и дејства лекова, употреба QSAR метода у дизајну лекова – дефиниција, QSAR једначина и анализа, методе машинског учења у дизајну лекова, локализација и мапирање функционалних група, идентификација фармакофоре, молекулски докинг, откривање водећих молекула употребом високо-пропусног скрининга и виртуелног скрининга.</p>			
<i>Практична настава</i>			
Предмет нема практичну наставу.			
Литература			
<ol style="list-style-type: none"> 1. Thomas Engel (Editor), Johann Gasteiger (Editor). Chemoinformatics: Basic Concepts and Methods. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2018. ISBN: 978-3-527-33109-3 2. Thomas Engel (Editor), Johann Gasteiger (Editor). Applied Chemoinformatics: Achievements and Future Opportunities. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2018. ISBN: 978-3-527-80654-6. 			
Број часова активне наставе: 30		Теоријска настава: 30	Практична настава: 0
Методe извођења наставe			
<ul style="list-style-type: none"> – Интерактивна теоријска настава – Консултације – Факултативна додатна настава 			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе	30 поена	Завршни испит	70 поена
активност у току предавања	30	писмени испит	70