

UČNI NAČRT PREDMETA / COURSE SYLLABUS

Predmet:	RAČUNALNIŠKO MODELIRANJE POVEZAV MED MOLEKULSKO STRUKTURO IN LASTNOSTJO (QSAR/QSPR)
Course Title:	COMPUTER MODELLING OF RELATIONS BETWEEN MOLECULAR TRUCTURE AND PROPERTIES (QSAR/QSPR)

Študijski program in stopnja Study Programme and Level	Študijska smer Study Field	Letnik Academic Year	Semester Semester
UŠP Kemija, 2. stopnja	/	1. ali 2.	1. ali 4.
USP Chemistry, 2 nd Cycle	/	1 st or 2 nd	1 st or 4 th

Vrsta predmeta / Course Type: izbirni strokovni / Elective Professional

Univerzitetna koda predmeta / University Course Code: K2I16

Predavanja Lectures	Seminar Seminar	Vaje Tutorial	Klinične vaje Work	Druge oblike študija	Samost. delo Individual Work	ECTS
45	30	/	/	/	75	5

Nosilec predmeta / Lecturer: izr. prof. dr. Marjana Novič

Jeziki / Languages: slovenski / Slovenian
Predavanja / Lectures: /
Vaje / Tutorial: /

Pogoji za vključitev v delo oz. za opravljanje študijskih obveznosti:

Študent oz. kandidat mora imeti predmet opredeljen kot študijsko obveznost.

Prerequisites:

The course has to be assigned to the student.

Vsebina:

- Predstavitev podatkovnih bank, ki so dostopne preko interneta in eventualno urejanje lastne banke podatkov za različne biološke lastnosti (doze in razredi toksičnosti, teratogenost, karcinogenost, vezavne konstante z določenimi encimi, itd.).
- Kodiranje kemijskih struktur (notacija SMILES, MDL, SDF, MOL)
- Izračun deskriptorjev (topološki, empirični, kvantno-kemijski, itd.) in uporaba ustreznih računalniških programov (DRAGON, CODESSA, itd.).

Uporaba različnih programskih paketov za gradnjo in validacijo QSPR modelov (linearna

Content (Syllabus outline):

regresija, metoda glavnih osi, nevronske mreže, itd.).

Temeljna literatura in viri / Readings:

- D.L Massart s soavtorji, Handbook of Chemometrics and Qualimetrics, Elsevier, Amsterdam, 1997. Part B, pp. 383-417
- J. Zupan, J. Gasteiger, Neural Networks in Chemistry and Drug Design: An Introduction, VCH, Weinheim, 1999. pp. 125-358

Dodatna literatura (Izbrana poglavja)

- L. Hansch, A. Leo, Exploring QSAR Fundamentals and Applications in Chemistry and Biology, American Chemical Society, Washington, DC 1995.

Dodatna seminarska literatura dosegljiva v okviru mentorskega dela

Cilji in kompetence:

Cilji: Spoznavanje računalniških metod za modeliranje lastnosti molekul. Poudarek je na lastnostih, ki so zanimive pri raziskavah novih zdravilnih učinkovin in za ocenjevanje nevarnosti spojin v okolju (kemijska regulativa).

Kompetence: Spoznavanje in uporaba ustreznih podatkovnih bank, ki vsebujejo podatke o strukturah in lastnosti spojin, in metod za delo s podatkovnimi bankami.

Spoznavanje in uporaba metod za kodiranje molekulskih struktur in za izračun molekulskih deskriptorjev.

Spoznavanje in uporaba statističnih metod modeliranja in validacije modelov.

Objectives and Competences:

Predvideni študijski rezultati:

Znanje in razumevanje

Razumevanje problematike, ki nastaja pri obdelavi velikega števila podatkov, spoznavanje mehanizmov delovanja spojin v bioloških sistemih.

Uporaba

Pri raziskovanju
Pri delu v kemijskih laboratorijih in proizvodnji
Pri kemijski regulativi (uporaba QSAR v

Intended Learning Outcomes:

Knowledge and Comprehension

Application

evropski REACH regulativi)	
<u>Refleksija</u> Študent bo interpretiral ter pred kolegi analiziral lastno razumevanje vsebine člankov iz znanstvenih revij. Pri tem bo uporabil pridobljena teoretična znanja ter jih vrednotil s predstavljenimi problemi iz literature/prakse.	<u>Analysis</u>
<u>Prenosljive spretnosti</u> Obvladanje računalniškega okolja	<u>Skill-transference Ability</u>

Metode poučevanja in učenja:

Predavanja s seminarji, vaje
Dialog
Mentorsko delo

Learning and Teaching Methods:

--

Načini ocenjevanja:

Izpit pisni in ustni. Ocene: 6-10 pozitivno
Ocena iz vaj (seminarska naloga) (1/2 ocene)

Delež (v %) /

Weight (in %) **Assessment:**

	"Type (examination, oral, coursework, project)"
--	---

Reference nosilca / Lecturer's references:

- NOVIČ, Marjana. Kohonen and counter-propagation neural networks applied for mapping and interpretation of IR spectra. V: LIVINGSTONE, David (ur.). Artificial neural networks : methods and applications. Humana Press, 2007, str. [1-15]. [COBISS.SI-ID 3836442]
- ŽUPERL, Špela, PRISTOVŠEK, Primož, MENART, Viktor, GABERC-POREKAR, Vladka, NOVIČ, Marjana. Chemometric approach in quantification of structural identity/similarity of proteins in biopharmaceuticals. J. chem. inf. mod., 2007, vol. 47, no. 3, str. 737-743. [COBISS.SI-ID 3725082]
JCR IF (2006): 3.423, SE (22/124), chemistry, multidisciplinary, x: 2.094, SE (4/87), computer science, information systems, x: 1.2, SE (5/87), computer science, interdisciplinary applications, x: 1.142 JCR IF: 3.581, SE (45/199), pharmacology & pharmacy, x: 2.645
- LETONDOR, Christophe, PORDEA, Anca, HUMBERT, Nicolas, IVANOVA, Anita, MAZUREK, Sylwester, NOVIČ, Marjana, WARD, Thomas R. Artificial transfer hydrogenases based on the biotin-(strept)avidin technology : fine tuning the selectivity by saturation mutagenesis of the host protein. J. Am. Chem. Soc., 2006, vol. 128, no. 25, str. 8320 -8328. [COBISS.SI-ID 3516442]
JCR IF: 7.696, SE (7/124), chemistry, multidisciplinary, x: 2.094