

**Табела 5.1. Спецификација предмета Анализа и рачунарско моделирање молекула**

<b>Назив предмета:</b> Анализа и рачунарско моделирање молекула			
<b>Наставник:</b> <a href="#">Сања О. Подунавац-Кузмановић</a> , <a href="#">Татјана М. Дошеновић</a>			
<b>Статус предмета:</b> Изборни за све студијске програме			
<b>Број ЕСПБ:</b> 10			
<b>Услов:</b> Нема			
<b>Циљ предмета</b> Стицање научних способности и академских вештина о савременим рачунарским методама које се примењују у QSAR анализи и моделовању молекула. Изучавање специјализованих компјутерских програма за молекулско моделовање и обучавање студената за примену тих програма у рационалном дизајнирању нових молекула.			
<b>Исход предмета</b> Стицање савремених знања о компјутерском дизајну молекула оспособиће студенте за активно укључивање у научно-истраживачку активност у овој области, ради убрзавања поступка изналажења нових једињења значајних у хемијској, фармацеутској и прехранбеној индустрији.			
<b>Садржај предмета</b> <i>Теоријска настава:</i> Дизајн и оптимизација структура молекула. Молекулски дескриптори (физичко-хемијски, тополошки, геометријски, електронски) за дефинисање квантитативног односа структуре једињења и њихових физичко-хемијских карактеристика, као и могућег биолошког учинка (QSPR/QSAR); савремени интерактивни програми и њихова примена за дефинисање молекулских дескриптора у QSPR/QSAR анализи. Савремени приступи нумеричком моделовању зависности између структуре једињења и њихових физичко-хемијских и биолошких карактеристика; шеме слагања QSPR/QSAR модела. Статистичке методе у процени QSPR/QSAR модела, као MLR, ANN, PCA и друге. <i>Студијски истраживачки рад:</i> Претраживање, обрада, анализа и дискусија достигнућа у савременој литератури у области QSPR/QSAR анализе. Израчунавање дескриптора који нумерички карактеришу одабране молекуле коришћењем погодних програмских пакета. Истраживање и развијање математичких модела који повезују физичко-хемијске и биолошке особине једињења са различитим структурним параметрима.			
<b>Литература</b> 1. S. O. Podunavac-Kuzmanović, Analiza zavisnosti antimikrobne aktivnosti od strukture derivata benzimidazola, monografija, Tehnološki fakultet, Novi Sad (2009) 2. F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, 2nd edition, John Wiley & Sons, Chichester (2007) 3. R. Mannhold (ed.), Molecular Drug Properties, Wiley-VCH, Weinheim (2008)			
<b>Број часова активне наставе</b>		<b>Теоријска настава: 4</b>	<b>Практична настава: 2</b>
<b>Методe извођења наставе</b> Интерактивна предавања и индивидуалне или групне консултације. Рад на рачунару, израда и презентација семинарског рада.			
<b>Оцена знања (максимални број поена 100)</b>			
<b>Предиспитне обавезе</b>	<b>поена</b>	<b>Завршни испит</b>	<b>поена</b>
активност у настави	10	усмени испит	40
презентација пројекта	20		
семинарски рад	30		