

Табела 5.1 Спецификација предмета на студијском програму докторских студија

Назив предмета: Анализа и рачунарско моделирање молекула		
Наставник или наставници: Сања О. Подунавац-Кузмановић , Татјана М. Дошеновић		
Статус предмета: изборни за све студијске програме		
Број ЕСПБ: 10		
Услов: нема		
Циљ предмета Стицање научних способности и академских вештина о савременим рачунарским методама које се примењују у QSAR анализи и моделовању молекула. Изучавање специјализованих комјутерских програма за молекулско моделовање и обучавање студената за примену тих програма у рационалном дизајнирању нових молекула.		
Исход предмета 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.		
Садржај предмета <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.		
Препоручена литература 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)		
Број часова активне наставе	Теоријска настава: 4	Студијски истраживачки рад: 2
Методе извођења наставе Интерактивна предавања и индивидуалне или групне консултације. Рад на рачунару, израда и презентација семинарског рада.		
Оцена знања (максимални број поена 100)		
Активност у настави:	10	
Презентација пројекта:	20	
Семинарски рад:	30	
Усмени испит:	40	