

**Табела 5.1** Спецификација предмета на заједничкој листи предмета докторских студија

<b>Назив предмета:</b>		<b>Анализа и рачунарско моделирање молекула</b>	
<b>Наставник:</b>		<b>Подунавац-Кузмановић О. Сања, Јеврић Р. Лидија</b>	
<b>Статус предмета:</b>		изборни за све студијске програме	
<b>Број ЕСПБ:</b>		10	
<b>Услов:</b>		нема	
<b>Циљ предмета</b>			
<p>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 молекула.</p>			
<b>Исход предмета</b>			
<p>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.</p>			
<b>Садржај предмета</b>			
<p><i>Теоријска настава:</i> Дизајн и оптимизација структура молекула. Молекулски дескриптори (физичко-хемијски, тополошки, геометријски, електронски и др.) 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.</p> <p><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.</p>			
<b>Препоручена литература</b>			
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Exploring QSAR: Fundamentals and Application in Chemistry and Biology, C. Hansch, A. Leo, D.H. Hoekman American Chemical Society, Washington DC, 1995.</li> <li>2. Exploring QSAR: Hydrophobic, Electronic and Steric Constants, C. Hansch, A. Leo, D.H. Hoekman, American Chemical Society, Washington DC, 1995.</li> <li>3. QSAR and Drug Design, Network Science, Bevan D.R., <a href="http://www.netsci.org/Science/Compchem/feature12.html">http://www.netsci.org/Science/Compchem/feature12.html</a>.</li> <li>4. QSAR, The Australian Computational Chemistry via the Internet Project, <a href="http://www.chem.swin.edu.au/modukes/mod4/index.html">www.chem.swin.edu.au/modukes/mod4/index.html</a>.</li> </ol>			
<b>Број часова активне наставе</b>		<b>Предавања: 4</b>	<b>Студијски истраживачки рад: 2</b>
<b>Методe извођења наставе:</b>			
<p>Интерактивна предавања и индивидуалне или групне консултације у зависности од броја студената. Рад на рачунару, израда и презентација семинарског рада.</p>			
<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	50
Студијски истраживачки рад:	10		
Семинарски рад	30		