



**УНИВЕРЗИТЕТ У КРАГУЈЕВЦУ
ФАКУЛТЕТ МЕДИЦИНСКИХ НАУКА**

**ДОКТОРСКЕ АКАДЕМСКЕ СТУДИЈЕ -
ФАРМАЦЕУТСКЕ НАУКЕ**

**РАЧУНАРСКЕ МЕТОДЕ У ДИЗАЈНИРАЊУ
ЛЕКОВА**

Школска 2023/2024.

Предмет: Рачунарске методе у дизајнирању лекова
Шифра предмета: DASF04

Предмет се вреднује са 6 ЕСПБ.

Недељно има 4 часа активне наставе (2 часа предавања и 2 часа студијског истраживачког рада - СИР).

НАСТАВНИЦИ:

| РБ | Име и презиме | Е-mail адреса | Звање |
|----|----------------|---------------------------------|--|
| 1. | Милош Николић | milos.nikolic@medf.kg.ac.rs | Ванредни професор, руководилац предмета |
| 2. | Марина Весовић | marina.mijajlovic@medf.kg.ac.rs | Ванредни професор |
| 3. | Невена Јерemiћ | nbarudzic@hotmail.com | Ванредни професор |

СТРУКТУРА ПРЕДМЕТА:

| Модул | Назив модула | Недеља | Предавања | СИР | Наставник руководилац модула |
|-------|--|--------|-----------|-----|------------------------------|
| 1. | Рачунарске методе у дизајнирању лекова | 5 | 6 | 6 | проф. др Милош Николић |
| | | | | | Σ 30+30=60 |

ОЦЕЊИВАЊЕ:

Студент савладава предмет на основу активности у току наставе, наставног колоквијума, семинарског рада и завршног испита. Оцена је еквивалентна броју освојених поена (видети табелу). Поени се стичу на четири начина:

АКТИВНОСТ У ТОКУ НАСТАВЕ:

На овај начин студент може освојити до 15 поена и то тако што се његово показано знање вреднује од 0-1 поен недељно. Оцењује се квалитет учешћа у дискусији током рада у малој групи.

НАСТАВНИ КОЛОКВИЈУМ:

На овај начин студент може стећи до 20 поена. Колоквијум се полаже писмено. У складу са показаним знањем задаци на колоквијуму се бодују од 0 до 1 поен.

СЕМИНАРСКИ РАД:

Током предмета сваки студент добија по једну тему за писање семинарског рада. Теме семинарских радова ће се уско наслањати на градиво предвиђено планом и програмом наставе. Семинарски рад студент је дужан да преда најкасније приликом пријаве испита. На овај начин студент може стећи до 15 поена. Оцењују се квалитет семинарског рада и презентације.

ЗАВРШНИ ИСПИТ: Испит се полаже усмено пред комисијом. На овај начин студент може стећи до 50 поена, а према приложеној табели.

| МОДУЛ | | МАКСИМАЛНО ПОЕНА | | | | |
|-------|--|--------------------------|---------------------|----------------|---------------|-----|
| | | Активност у току наставе | Наставни колоквијум | Семинарски рад | Завршни испит | Σ |
| 1. | Рачунарске методе у дизајнирању лекова | 15 | 20 | 15 | 50 | 100 |
| | Σ | 15 | 20 | 15 | 50 | 100 |

Завршна оцена се формира на следећи начин:

Да би студент положио предмет мора да оствари минимум 51 поен.

Оцена се формира на следећи начин:

| Број освојених поена | Оцена |
|----------------------|-------|
| 0-50 | 5 |
| 51-60 | 6 |
| 61-70 | 7 |
| 71-80 | 8 |
| 81-90 | 9 |
| 91-100 | 10 |

ПРЕПОРУЧЕНА ЛИТЕРАТУРА:

| МОДУЛ | НАЗИВ УЦБЕНИКА | АУТОРИ | ИЗДАВАЧ | БИБЛИОТЕКА |
|--|---|---------------------------------|--|-------------------|
| 1. Рачунарске методе у дизајнирању лекова | In Silico Approaches in Drug Design | Oswaldo Andrade Santos-Filho | MDPI, Basel, 2022. | Има |
| | Foye's Principles of Medical Chemistry | Thomas Lemke | Wolters Kluwer, Philadelphia, 2013. | Има |

РАЧУНАРСКЕ МЕТОДЕ У ДИЗАЈНИРАЊУ ЛЕКОВА

| Недеља | Време и место | Фацилитатор | Тематска јединица |
|--|---------------|--|---|
| МОДУЛ 1: РАЧУНАРСКЕ МЕТОДЕ У ДИЗАЈНИРАЊУ ЛЕКОВА | | | |
| I | | проф. др Милош Николић проф. др Марина Весовић проф. др Невена Јерemiћ | Основе Компјутерски Потпомогнутог Дизајна Лекова (<i>Computer-Aided Drug Design</i>). Базе података (<i>Uniprot, PubChem, RCSB-PDB, PDB Europe, ZINC, ChEMBL</i>). Разумевање и конверзија формата молекула (<i>sdf, mol, mol2, pdb, pdbqt</i>), 1D дескриптори молекула (<i>SMILES, InChI</i>). Теоријске методе и рачунарски програми за молекулско моделирање, конформациону анализу и прорачун молекулских дескриптора. |
| II | | проф. др Милош Николић проф. др Марина Весовић проф. др Невена Јерemiћ | Дизајн лекова заснован на структури лиганда (<i>Ligand-Based Drug Design</i>). Дизајн фармакофоре. Рачунарске методе за испитивање и оптимизовање АДМЕТ особина нових фармаколошки активних једињења. <i>In silico</i> скрининг токсичности једињења. |
| III | | проф. др Милош Николић проф. др Марина Весовић проф. др Невена Јерemiћ | Врсте нековалентних интеракција лекова са биомолекулима. Слабе интеракције, водоничне везе, <i>Van der Waals</i> -ове силе, дипол-дипол интеракције, хидрофобне интеракције. Дизајн лекова заснован на структури циљаног протеина (<i>Structure-Based Drug Design</i>). Хомолого моделирање. Студије молекуског докинга малих органских молекула коришћењем софтвера <i>AutoDock Vina/AutoDock</i> . |
| IV | | проф. др Милош Николић проф. др Марина Весовић проф. др Невена Јерemiћ | Студије молекуског докинга координационих једињења коришћењем софтвера <i>AutoDock</i> . Студије молекуског докинга малих органских молекула коришћењем софтвера <i>Open Eye</i> . Увод у молекулску динамику. Студије симулације молекулске динамике. |
| V | | проф. др Милош Николић проф. др Марина Весовић проф. др Невена Јерemiћ | Примена <i>in silico</i> метода у биомедицинским истраживањима: процена антивирусног потенцијала различитих природних и синтетских молекула у лечењу <i>COVID-19</i> инфекције, скрининг <i>HIV</i> антивиротика - инхибитори <i>HIV-1</i> протеазе и инхибитори интегразе. Квантитативни односи структуре и активности у дизајну лекова. Методологија и формирање <i>QSAR</i> модела. Дизајн <i>QSAR</i> студија. |

Предлог потенцијалних тема докторских дисертација

1. *In silico* скрининг молекула са потенцијалном антивирусном активношћу. Принцип пренамене лекова.
2. *In silico* дизајн и молекулско моделирање нових лекова у лечењу неуроинфламације.
3. Молекуско моделирање координационих једињења у процени интеракција са релевантним биомолекулима.
4. *In silico* идентификација сигналних путева у биохемијским процесима.