



УНИВЕРЗИТЕТ У КРАГУЈЕВЦУ
ФАКУЛТЕТ МЕДИЦИНСКИХ НАУКА

ДОКТОРСКЕ АКАДЕМСКЕ СТУДИЈЕ (ДАС)
„ФАРМАЦЕУТСКЕ НАУКЕ“

**РАЧУНАРСКЕ МЕТОДЕ У ДИЗАЈНИРАЊУ
ЛЕКОВА**

Информатор предмета
Школске 2024/2025
(I семестар)

Статус предмета: Изборни

Број ЕСПБ: 6 ЕСПБ

Семестар: I

Шифра предмета: ДАСФ4

Циљ предмета: Упознавање студената са основним методама компјутерски потпомогнутог дизајна лекова које се користе у области савременог развоја и испитивања нових лекова, као и оспособљавање студената за самостално дизајнирање и израду *in silico* студија.

Исход предмета: По завршетку наставе, студент ће бити оспособљен да: претражује протеинске базе података и базе биолошки активних молекула; користи рачунарске програме за дизајн фармакофоре; врши испитивање и оптимизовање АДМЕТ особина нових фармаколошки активних једињења; спроводи *in silico* скрининг токсичности једињења; дизајнира и спроведе студије молекулског докинга и студије симулације молекулске динамике; критички анализира и тумачи резултате студија молекулског докинга и молекулске динамике; врши *in silico* идентификацију сигналних путева у биохемијским процесима; користи рачунарске програме за израчунавање различитих молекулских дескриптора; дизајнира, спроведе; критички анализира и тумачи QSAR студије.

Активна настава - недељно има 4 часова активне наставе (2 часа предавања и 2 часа студијског истраживачког рада).

СТРУКТУРА ПРЕДМЕТА:

ТАБЕЛА 1.

МОДУЛ	семестар	недеља	Предавања	СИР
1. Дизајн лекова заснован на структури циљаног протеина	I	8	16	16
2. Дизајн лекова заснован на структури лиганда. QSAR	I	7	14	14

НАСТАВНИЦИ :

ТАБЕЛА 2.

Р.б	Име и презиме наставника	Електронска пошта наставника	Звање наставника
1.	Милош В. Николић	milos.nikolic@fmn.kg.ac.rs	Ванредни професор (руководилац предмета)
2.	Марина Ж. Весовић	marina.vesovic@fmn.kg.ac.rs	Ванредни професор
3.	Невена С. Јерemiћ	njeremic@fmn.kg.ac.rs	Ванредни професор

ОЦЕНА ЗНАЊА (максималан број поена 100):

Оцена се формира на основу збира поена стечених током предиспитних обавеза и на завршном испиту.

Студент савладава предмет по модулима. Оцена је еквивалентна броју стечених поена (види табеле).

Предиспитне обавезе	Поена	Завршни испит	Поена
Активност у току наставе	15	Писмени испит	
Колоквијуми	20	Практични испит	
Семинари	15	Усмени испит	50

ТАБЕЛА 3.

МОДУЛ	МАКСИМАЛНО ПОЕНА				
	Предиспитне обавезе			Завршни испит	Σ
	Активност у току наставе	Колоквијуми	Семинари	Усмени испит	
1. Дизајн лекова заснован на структури циљаног протеина	8	10	8		
2. Дизајн лекова заснован на структури лиганда. QSAR	7	10	7		
Σ	15	20	15	50	100

Завршна оцена се формира на следећи начин:

Да би студент положио предмет мора стећи најмање 51 поен, при чему у сваком делу оцене знања мора да стекне више од 50% поена. Оцена се формира на следећи начин:

БРОЈ СТЕЧЕНИХ ПОЕНА	ОЦЕНА
0 - 50	5
51 - 60	6
61 - 70	7
71 - 80	8
81 - 90	9
91 - 100	10

РАЧУНАРСКЕ МЕТОДЕ У ДИЗАЈНИРАЊУ ЛЕКОВА

Недеља	Датум	Време	Сала	Наставник	Методска јединица	Број часова	
						ПРЕДАВАЊА	СИП
I	18.01.2025	15:30-17:00	Анатомска сала	Милош В. Николић	Основе Компјутерски Потпомогнутог Дизајна Лекова (<i>Computer-Aided Drug Design</i>).	2	2
II	19.01.2025	15:30-17:00	Анатомска сала	Невена С. Јеремић	Базе података (<i>Uniprot, PubChem, RCSB-PDB, PDB Europe, ZINC, ChEMBL</i>). Разумевање и конверзија формата молекула (sdf, mol, mol2, pdb, pdbqt), 1D дескриптори молекула (SMILES, InChI).	2	2
III	25.01.2025	14:00-15:30	Анатомска сала	Невена С. Јеремић	Врсте нековалентних интеракција лекова са биомолекулима. Слабе интеракције, водоничне везе, <i>Van der Waals</i> -ове силе, дипол-дипол интеракције, хидрофобне интеракције.	2	2
IV	25.01.2025	15:30-17:00	Анатомска сала	Марина Ж. Весовић	Дизајн лекова заснован на структури циљаног протеина (<i>Structure-Based Drug Design</i>). Хомолого моделирање.	2	2
V	01.02.2025	14:00-15:30	Анатомска сала	Милош В. Николић	Студије молекуског докинга малих органских молекула коришћењем софтвера <i>AutoDock Vina/AutoDock</i> .	2	2
VI	01.02.2025	15:30-17:00	Анатомска сала	Марина Ж. Весовић	Студије молекуског докинга координационих једињења коришћењем софтвера <i>AutoDock</i> .	2	2
VII	08.02.2025	11:00-12:30	Анатомска сала	Милош В. Николић	Студије молекуског докинга малих органских молекула коришћењем софтвера <i>Open Eye</i> .	2	2
VIII	08.02.2025	12:30-14:00	Анатомска сала	Милош В. Николић	Увод у молекулску динамику. Студије симулације молекулске динамике.	2	2

РАЧУНАРСКЕ МЕТОДЕ У ДИЗАЈНИРАЊУ ЛЕКОВА

Недеља	Датум	Време	Сала	Наставник	Методска јединица	Број часова	
						ПРЕДАВАЊА	СИП
IX	09.02.2025	09:30 – 11:00	Анатомска сала	Марина Ж. Весовић	Рачунарске методе за испитивање и оптимизовање АДМЕТ особина нових фармаколошки активних једињења.	2	2
X	22.02.2025	11:00 – 12:30	Анатомска сала	Невена С. Јеремић	<i>In silico</i> скрининг токсичности једињења.	2	2
XI	22.02.2025	12:30 – 14:00	Анатомска сала	Марина Ж. Весовић	Дизајн лекова заснован на структури лиганда (<i>Ligand-Based Drug Design</i>). Дизајн фармакофоре.	2	2
XII	23.02.2025	09:30 – 11:00	Анатомска сала	Марина Ж. Весовић	Теоријске методе и рачунарски програми за молекулско моделирање, конформациону анализу и прорачун молекулских дескриптора.	2	2
XIII	01.03.2025	11:00 – 12:30	Анатомска сала	Марина Ж. Весовић	Квантитативни односи структуре и активности у дизајну лекова.	2	2
XIV	01.03.2025	12:30 – 14:00	Анатомска сала	Милош В. Николић	Методологија и формирање <i>QSAR</i> модела. Дизајн <i>QSAR</i> студија.	2	2
XV	02.03.2025	12:00 – 13:30	Анатомска сала	Милош В. Николић	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.	2	2

ПРЕПОРУЧЕНА ЛИТЕРАТУРА:

- Santos-Filho OA. In Silico Approaches in Drug Design. Basel: MDPI; 2022. Dostupno na: <https://www.mdpi.com/books/book/6252-in-silico-approaches-in-drug-design>.
- Lemke T. Foye's Principles of Medical Chemistry. Philadelphia: Wolters Kluwer; 2013.

УПУТСТВО ЗА ФОРМАТИРАЊЕ СЕМИНАРСКИХ РАДОВА:

Радови треба да буду написани ћириличним писмом

(изузети су: међународне скраћенице, латински изрази и дијагнозе, непреводиве речи страног језика...)

Остала правила:

Врста слова: Times New Roman

Величина слова: 12

проред: 1.5

поравњање: обострано

насловна страна садржи:

- назив универзитета и факултета
- редни број или назив модула
- недељу наставе
- наслов рада
- име и презиме аутора
- школску годину

последња страница сваког рада мора да садржи следеће табеле за оцењивање:

Докторанд:	
Недеља наставе:	
Наслов семинарског рада:	
Наставник:	
Оцена:	

Скала за оцењивање:

1 - значи да стандард није досегнут

3 – значи да је стандард постигнут

5 – значи да је рад креативнији од уобичајеног

Кохерентност (логичка повезаност и доследност)	1	2	3	4	5
Потпуност	1	2	3	4	5
Подесност (прилагођеност задатим условима)	1	2	3	4	5
Релевантност (однос досегнутих циљева и детаља)	1	2	3	4	5
Квалитет формирања текста	1	2	3	4	5
Време	Кашњење у слању радова смањује оцену				
Σ					

Коментар: