

NAZIV PREDMETA		Modeliranje i simulacije biomakromolekula				
Kod	PMP249	Godina studija	1.			
Nositelj/i predmeta	doc. dr. sc. Željka Sanader Maršić	Bodovna vrijednost (ECTS)	5			
Suradnici	izv. prof. dr. sc. Larisa Zoranić	Način izvođenja nastave (broj sati u semestru)	P	S	L	T
			30		30	
Status predmeta	Obvezni	Postotak primjene e-učenja	10			
OPIS PREDMETA						
Ciljevi predmeta	Razumijevanje metoda molekularne dinamike i kvantno-mehaničkih metoda i njihova primjena na biomakromolekule.					
Uvjeti za upis predmeta i ulazne kompetencije potrebne za predmet	Osnova znanja fizike, biologije, statističke mehanike, termodinamike, klasične i kvantne mehanike, osnove programiranja					
Očekivani ishodi učenja na razini predmeta (4-10 ishoda učenja)	<p>Nakon završenog kolegija studentu će moći:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Prepoznati i diskutirati znanstvene ideje pri modeliranju stvarnosti, te značaj modeliranja u biologiji i medicini. 2. Razumjeti teorijske osnove metode molekularne dinamike i kvantno-mehaničke metode modeliranja. 3. Poznavati algoritme i tehnike koje se koriste pri modeliranju bioloških molekularnih sustava. 4. Samostalno modelirati, simulirati i analizirati jednostavne i neke od složenijih sustava biomakromolekula metodom molekularne dinamike. 5. Razumjeti razliku molekularno mehaničkih i kvantno mehaničkih metoda 6. Koristiti teoriju funkcionala gustoće za određivanje energetski najpovoljnije strukture te njenog vibracijskog i apsorpcijskog spektra. 7. Modelirati enzim pomoću hibridne kvantno mehaničke / molekularno mehaničke metode. 8. Koristiti programe za vizualizaciju biomakromolekula. 					
Sadržaj predmeta detaljno razrađen prema satnici nastave	<p>Tjedni plan nastave: UVOD 1. Presentacija predmeta; Metode modeliranja biomolekula– osnovne karakteristike i bitne razlike između empirijskih i kvantno-mehaničkih metoda; Korištenje Linux operativnog sustava na računalnim klasterima, osnovne naredbe, pokretanje/praćenje izračuna na računalnom klasteru; 2. Baza trodimenzionalnih struktura makromolekula «Protein Data Bank» (PDB); Programi za predviđanje 3D strukture; Odabrani programski alati za vizualizaciju biomolekula; Gromacs i Gaussian programski paketi; OSNOVA MD 3. Osnove metode molekularne dinamike (MD): jednadžbe gibanja, numerički integratori, termodinamička i statističko-mehanička osnova metode MD, početni uvjeti u simulacijama bioloških sustava; 4. Polja sile (klasična atomska polja sile, modeli krupnog zrna ...); Modeli otapala; Simulacija; Račun statičkih i dinamičkih veličina u MD; SIMULACIJE MD 5. MD simulacija proteina u vodi; Analize strukturnih veličina; Vizualizacija bioloških sustava; 6. MD simulacije složenih sustava (na primjer: protein i ligand, membranski proteini, asocijacije proteina); Analiza međudjelovanja proteina i okoline; 7. Napredne metode uzorkovanja: „Umbrella sampling“; OSNOVA QM 8. Osnove kvantno-mehaničke (QM) metode; Uvod u teoriju funkcionala gustoće (aproksimacije, Hohenberg–Kohn teoremi, samousuglašeno polje...);</p>					

	<p>9. Funkcionalni, bazni setovi; Ograničenja metode; SIMULACIJE QM</p> <p>10. QM simulacije peptida (optimizacija geometrije, vibracijski spektri, apsorpcijski spektri);</p> <p>11. QM cluster (klaster) metoda; SIMULACIJE QM/MM</p> <p>12. Hibridne kvantno-mehaničke/molekularno-mehaničke (QM/MM) metode: pristup zbrajanja i pristup oduzimanja doprinosa, mehaničko i električno ugrađivanje, tretiranje granice QM i MM dijela sustava;</p> <p>13. Modeliranje enzima pomoću QM/MM metode; IZBORNE TEME</p> <p>14. i 15. Izborne teme prema interesu studenata: neravnotežna MD, simulacije u ograničenim prostorima, optička svojstva organskih boja, izrada simulacijskih filmova;</p>					
Vrste izvođenja nastave:	<input checked="" type="checkbox"/> predavanja <input type="checkbox"/> seminari i radionice <input checked="" type="checkbox"/> vježbe <input type="checkbox"/> on line u cijelosti <input type="checkbox"/> mješovito e-učenje <input type="checkbox"/> terenska nastava		<input checked="" type="checkbox"/> samostalni zadaci <input type="checkbox"/> multimedija <input checked="" type="checkbox"/> laboratorij <input type="checkbox"/> mentorski rad <input checked="" type="checkbox"/> domaće zadaće			
Obveze studenata	Prisustvo i zalaganje studenta na satu, izrada zadataka na satu, izrada zadataka kod kuće, izrada seminara koji uključuje samostalno istraživanje nekog fizikalnog problema, pisanje izvještaja i prezentacija istog.					
Praćenje rada studenata (<i>upisati udio u ECTS bodovima za svaku aktivnost tako da ukupni broj ECTS bodova odgovara bodovnoj vrijednosti predmeta</i>):	Naziv	Ects	Naziv	Ects	Naziv	Ects
	Pohađanje nastave	2	Istraživanje		Eksperimentalni rad	
	Usmeni ispit		Referat		Domaće zadaće	1
	Seminarski rad	1	Esej			
	Kolokvij		Praktični rad	1		
	Pismeni ispit		Projekt			
Ocjenjivanje i vrjednovanje rada studenata tijekom nastave i na završnom ispitu	Uvjeti za polaganje ispita su: sposobnost korištenja postojećih programa za modeliranje biomakromolekula. Ocjenjivanje kroz vježbe na računalu, domaće zadaće i završni seminar. Ocjena se zaključuje prema ocjeni studentskog zalaganja u nastavi i ocjeni seminara.					
Obvezna literatura (dostupna u knjižnici i putem ostalih medija)	Naslov			Broj primjeraka u knjižnici	Dostupnost putem ostalih medija	
	[1] Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, Christopher J. Cramer, John Wiley & Sons Ltd, England, 2004			0	da	
	[2] Molecular Simulations: Fundamentals and Practice, Saman Alavi, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co., Germany, 2020			0	da	

	[3] Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications Daan Frenkel and B. Smit, Academic Press, 2001	0	da
Dopunska literatura	[1] P. Allen & D. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Clarendon, Press, Oxford, 1987. [2] Znanstveni članci, predavanja.		
Načini praćenja kvalitete koji osiguravaju stjecanje utvrđenih ishoda učenja	Ocjenjivanje studenata putem anonimnih upitnika na kraju kolegija. Istraživanje se provodi prema pravilima Sveučilišta u Splitu.		
Ostalo (prema mišljenju predlagatelja)			