



УНИВЕРЗИТЕТ У БАЊОЈ ЛУЦИ
UNIVERSITY OF BANJA LUKA
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ
FACULTY OF NATURAL SCIENCES AND MATHEMATICS



STUDIJSKI PROGRAM HEMIJA

TREĆI CIKLUS STUDIJA - DOKTORSKE STUDIJE

Naziv predmeta	Odabrana poglavlja hemijske informatike			
Šifra predmeta	Status predmeta	Semestar	Fond časova	Broj ECTS bodova
HEM23OPI	izborni	I, II, III, IV	5+0	10
Nastavnici	prof. dr Dragan Matić, doc. dr Milana Grbić			

Uslovljenost drugim predmetima	Oblik uslovljenosti
nema	/

Ciljevi izučavanja predmeta
Cilj kursa je da studenti ovladaju metodama za predstavljanje, manipulaciju, analiziranje i sintetizovanje hemijskih informacija neophodnih za naučnoistraživački rad studenta

Ishodi učenja (stečena znanja)
Student: Razumije principe različitih reprezentacija molekula. Razlikuje i koristi različite formate za predstavljanje informacija o hemijskim strukturama. Odabire najpogodnije formate za predstavljanje hemijskih reakcija za primjenu različitih računarskih alata. Koristi različite računarske alate za obradu hemijskih informacija. Koristi tehnike programiranja za manipulaciju hemijskim podacima. Manipuliše bazama podataka u kojima se pohranjuju informacije o hemijskim strukturama i njihovim odnosima. Koristi tehnike vještačke inteligencije za izvlačenje korisnih informacija iz hemijskih podataka.

Sadržaj predmeta
*Principi molekularne reprezentacije: Hemijska i matematička notacija, Specifični tipovi hemijskih struktura, Prostorna reprezentacija hemijskih struktura. *Računarska obrada informacija o hemijskim strukturama: Standardni formati informacija o hemijskim strukturama, Hemijske strukture kao ulazno/izlazni podaci, Procesiranje 3D strukturalnih informacija. *Računarska obrada informacija o hemijskim reakcijama: Tipovi reakcija, Jednačine reakcija, Učenje iz informacija o hemijskim reakcijama, Baze podataka o hemijskim reakcijama, Klasifikacija hemijskih reakcija. *Podaci: Tipovi podataka, Čuvanje podataka i upravljanje podacima. *Baze podataka i izvori podataka u hemiji: Osnovni sistemi baza hemijskih podataka, Baze podataka o jedinjenjima, Baze podataka o reakcijama. *Pretraživanje hemijskih struktura: Pretraživanje kompletnih struktura, Pretraživanje dijelova struktura, Pretraživanje sličnih struktura, Pretraživanje 3D struktura, Pretraživanje proteinskih i aminokiselinskih sekvenci.

Metode nastave i savladavanje gradiva
Konsultativna nastava

Knjige i drugi nastavni materijal
1. Engel, Thomas, and Johann Gasteiger, eds. Chemoinformatics: basic concepts and methods. John Wiley & Sons, 2018. 2. Varnek, Alexandre, ed. Tutorials in chemoinformatics. John Wiley & Sons, 2017.

Oblici provjere znanja i ocjenjivanja			
Seminarski rad, završni ispit			
Seminarski rad	40	Završni ispit	60

Posebna naznaka za predmet	
Ime i prezime nastavnika koji je pripremio podatke	Dragan Matić, Milana Grbić