



## Hrvatsko društvo za istraživanje raka (HDIR)

Bijenička c. 54, HR-10000 Zagreb

Tel: 01/4571-292

Fax: 01/4561-010

<http://www.hdir.hr>

e-mail: [info@hdir.hr](mailto:info@hdir.hr)

OIB: 01690550600

MB: 2517744

## Hrvatsko društvo za istraživanje raka

3., 4. i 7. prosinca 2020. g. organizira trodnevnu *on-line* radionicu

### Uvod u molekulsko modeliranje

Cilj radionice je upoznati studente i istraživače s *in silico* metodama molekuskog modeliranja (MM), posebice s njihovom primjenom u istraživanju molekularnih osnova bolesti i otkrivanju novih biološki aktivnih spojeva. Prvi dan na radionici će biti predstavljene metode MM koje se često koriste u interdisciplinarnom istraživačkom radu, kao što su molekulsko uklapanje i virtualni probir spojeva, molekulska dinamika, komparativno modeliranje proteina te modeliranje odnosa strukture i aktivnosti ((Q)SAR). Uz kratki opis temeljnih pretpostavki i teorijske pozadine, bit će dani konkretni primjeri iz prakse. Drugi i treći dan bit će orijentirani na praktičnu primjenu prikazanog kroz rješavanje zadataka. Za potrebe radionice sudionici trebaju imati svoja računala i instalirati besplatne programe [Zoom](#) te [Marvin](#) (ChemAxon) i [Pymol](#) (potrebna je prethodna registracija).

Radionicu vode **dr. sc. Višnja Stepanić, mr. sc. Luka Bilić, mr. sc. Sara Matić i prof. dr. sc. Sanja Tomić** s Instituta Ruđer Bošković.

Radionica će se održati tijekom **tri dana putem interneta**, a počinje u četvrtak **3. prosinca u 9:30 h** (sudionici će na e-mail adrese dobiti linkove za Zoom webinare).

**Broj sudionika** na radionici je ograničen na **max. 20** te je obavezna registracija preko *on-line* obrasca dostupnog na <http://tiny.cc/hll1tz>

Za sudjelovanje na radionici potrebno je na račun HDIR-a (IBAN HR5023600001102084564) uplatiti **kotizaciju** u iznosu od 100 kn. Nakon radionice polaznici će dobiti potvrdu o sudjelovanju.

## Program:

<b>PRVI DAN</b>	<i>3. prosinca 2020. (četvrtak)</i>
09:30-10:15	Molekulsko modeliranje – što je to? <i>Stepanić Višnja</i>
10:15-10:45	Pauza
10:45-11:30	Molekulsko uklapanje. Modeliranje farmakofora. Virtualni probir aktivnih molekula. <i>Višnja Stepanić</i>
11:30-12:30	Molekulska dinamika. Komparativno modeliranje proteina. <i>Luka Bilić</i>
12:30-13:30	Pauza
13:30–14:30	Modeliranje odnosa strukture i aktivnosti / svojstava. Kvantitativni modeli. 1D-4D. <i>Sanja Tomić</i>
14:30-15:30	Klasifikacijski modeli. ADME. Molekularna sličnost. <i>Višnja Stepanić</i>

<b>DRUGI DAN</b>	<i>4. prosinca 2020. (petak)</i>
09:30-11:00	Crtanje kemijskih spojeva i pretraživanje baza podataka s biološkim aktivnostima. <i>Višnja Stepanić</i>
11:00-11:30	Pauza
11:30-13:00	Dohvat eksperimentalno određenih 3D struktura proteina / DNA preko interneta. Vizualizacija makromolekula. <i>Sanja Tomić, Sara Matić</i>
13:00-14:00	Pauza
14:00-15:30	Vizualizacija i analiza kompleksa. Molekulsko uklapanje. <i>Luka Bilić</i>

<b>TREĆI DAN</b>	<i>7. prosinca 2020. (ponedjeljak)</i>
09:30-11:00	Zajedničko prolaženje kroz zadatke dobivene za rješavanje. <i>svi predavači</i>