



Hrvatsko društvo za istraživanje raka - HDIR

Bijenička 54, HR-10000 Zagreb

Tel: 01/4571-292

<http://www.hdir.hr>

OIB: 01690550600

e-mail: info@hdir.hr

MB: 2517744

Hrvatsko društvo za istraživanje raka

1. listopada 2018. g. organizira jednodnevnu radionicu

„Uvod u molekulsko modeliranje“

Cilj radionice je upoznati istraživače koji u svom radu koriste eksperimentalne metode s komplementarnim *in silico* metodama molekuskog modeliranja (MM), posebice s njihovom primjenom u istraživanju molekularnih osnova bolesti. Na radionici će biti predstavljene neke od metoda MM koje se često koriste u interdisciplinarnom istraživačkom radu, kao što su komparativno modeliranje proteina, molekulsko uklapanje, molekulska dinamika, virtualni probir aktivnih kemijskih spojeva, modeliranje kvantitativnog odnosa strukture i aktivnosti (engl. Quantitative Structure-Activity Relationship, QSAR) te utjecaja fizikalno-kemijskih svojstava na ADME/Tox obilježja kemijskih spojeva (engl. Absorption, Distribution, Metabolism and Excretion/Toxicology). Uz kratki opis temeljnih pretpostavki i teorijske pozadine, bit će dani konkretni primjeri iz prakse. U sklopu ove radionice polaznici će i praktično sudjelovati u pretraživanju javno dostupnih baza podataka kemijskih spojeva i njihovih bioloških interakcija. Također će biti upoznati s programima za vizualizaciju kemijskih spojeva i njihovih kompleksa (ChemAxon, Pymol, VMD).

Radionicu vode **dr. sc. Višnja Stepanić**, **dr. sc. Marko Tomin** i **prof. dr. sc. Sanja Tomić** s Instituta Ruđer Bošković (IRB) koji u svom radu primjenjuju metode MM u istraživanju interakcije kemijskih spojeva s biološkim molekulama, proteinima i nukleinskim kiselinama, u cilju razumijevanja mehanizma njihovog djelovanja i dizajna novih spojeva s biološkim djelovanjem.

Radionica će se održati u **ponedjeljak, 1. listopada 2018. g.** u računalnoj učionici knjižnice V. krila Instituta Ruđer Bošković (Bijenička 54, Zagreb) s početkom u **9h**.

Sudjelovanje na radionici je besplatno, ali s obzirom da je broj sudionika ograničen (max. 16) potrebna je registracija preko web stranica HDIR-a: <http://www.hdir.hr>

Program:

09:00-09:45	Molekulsko modeliranje – što je to? <i>Višnja Stepanić, IRB</i>
09:45-10:30	Komparativno modeliranje proteina. Molekulska dinamika. <i>Marko Tomin, IRB</i>
10:30-11:00	pauza (kavu sponzorira HDIR)
11:00-11:45	Molekulsko uklapanje. Modeliranje farmakofora. Virtualni probir aktivnih molekula. <i>Višnja Stepanić, IRB</i>
11:45-12:30	Modeliranje odnosa strukture i aktivnosti / svojstava kemijskih spojeva. kvantitativni modeli. 1D-4D. <i>Sanja Tomić, IRB</i>
12:30-13:00	Klasifikacijski modeli. ADME. Molekularna sličnost. <i>Višnja Stepanić, IRB</i>
13:00-14:00	pauza za ručak
14:00-15:00	Crtanje kemijskih spojeva i pretraživanje baza podataka s biološkim aktivnostima. <i>Višnja Stepanić, IRB</i>
15:00-16:00	Dohvat eksperimentalno određenih 3D struktura proteina/DNA preko interneta. Vizualizacija i analiza kompleksa. <i>Sanja Tomić, Višnja Stepanić i Marko Tomin, IRB</i>