Informačný list predmetu

Akademický rok 2026/2027

Vysoká škola	Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave
Fakulta	FPV UCM
Kód predmetu	KBT/bd555/21
Názov predmetu	počítačové modelovanie
Rozsah	3S
Počet kreditov	3
Vyučujúci	doc. Ing. Tibor Maliar, PhD. (prednášajúci)

Podmienky na absolvovanie predmetu

Účasť na vyučovaní v súlade so Študijným poriadkom UCM v Trnave, v rámci praktického vyučovania študenti vypracujú a odovzdajú príslušného zadania z každej hodiny.

Záverečné hodnotenie

Celkové hodnotenie predmetu:
A 1,0 výborne – vynikajúce výsledky len s minimálnymi chybami ‹92-100 %›;
B 1,5 veľmi dobre – nadpriemerné výsledky s menšími chybami ‹83-91 %›;
C 2,0 dobre – vcelku dobré, priemerné výsledky ‹74-82 %›;
D 2,5 uspokojivo – dobré výsledky, ale vyskytujú sa významné chyby ‹65-73 %›;
E 3,0 dostatočne – výsledky vyhovujú minimálnym kritériám ‹56-64 %›;
FX* 4,0 nedostatočne – absolvovanie predmetu si vyžaduje vynaložiť ešte značné úsilie a množstvo práce zo strany študenta ‹0-55 %›.

Výsledky vzdelávania

Cieľom predmetu
- je štúdium moderných metód a princípov používaných pri projektovaní, výskume a vývoji nových látok a materiálov v rámci novo konštituovaného racionálneho projektovania molekúl (CAMD COMPUTER-AIDED MOLECULAR DESIGN).
- Predmet zahŕňa aj aplikácie v biológii

Stručná osnova predmetu

1. Úvod - Sprostredkovanie nových vedomostí študentom
2. Základy vývoja nových materiálov a liečiv s využitím moderných metód počítačom podporovaného projektovania molekúl (CAMD).
3. Hľadanie zlúčenín s potenciálnym terapeutickým účinkom, ktoré spĺňajú požadované kritériá (vysoká účinnosť a špecificita).
4. Hľadanie zlúčenín s potenciálnym terapeutickým účinkom, ktoré spĺňajú požadované kritériá (minimálna toxicita).
5. Hľadanie zlúčenín s potenciálnym terapeutickým účinkom, ktoré spĺňajú požadované kritériá (dobrá biologická dostupnosť).
6. Hľadanie zlúčenín s potenciálnym terapeutickým účinkom, ktoré spĺňajú požadované kritériá (vysoká

účinnosť a špecificita, minimálna toxicita, dobrá biologická dostupnosť).
7. Využitie počítačov, informatiky, štatistiky, matematiky, chémie, fyziky, biológie a medicíny.
8. Využitie počítačovej grafiky na zobrazovanie a manipuláciu s chemickými štruktúrami s cieľom syntézy "in silico" nových molekúl,
9. určenia ich konformácie a odhadu podobnosti (alebo nepodobnosti) súboru zlúčenín.
10. Výpočet interakčnej energie medzi molekulami liečiva a hypotetickými alebo experimentálne zistenými štruktúrami makromolekúl (receptory).
11. Objasnenie procesov rozpoznávania „ligandov" na molekulovej úrovni
12. stimulácia kreativity výskumu a vývoja nových molekúl.

Odporúčaná literatúra

Remko, M.: Metódy výskumu a vývoja liečiv. Bratislava, SAP 1999. 235 s.
Remko, M.: Molekulové modelovanie. Bratislava, SAP 2000. 240 s.
Remko, M.: Základy medicínskej a farmaceutickej chémie. Bratislava, SAP 2005. 392 s.
Nag, A,. Dey, B. Computer-Aided Drug Design and Delivery Systems, The McGraw-Hill, 2011.

Jazyk, ktorého znalosť je potrebná na absolvovanie predmetu

slovenský jazyk

Poznámky

Povinne voliteľný predmet.
3 hodiny seminárov týždenne.
Vzdelávacia činnosť sa uskutočňuje prezenčnou metódou