

Informačný list predmetu

Akademický rok 2026/2027

Vysoká škola	Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave
Fakulta	FPV UCM
Kód predmetu	KBT/bd353/25
Názov predmetu	počítačové modelovanie
Rozsah	3S
Počet kreditov	2
Vyučujúci	doc. Ing. Tibor Maliar, PhD. (prednášajúci)

Podmienky na absolvovanie predmetu

Účasť na vyučovaní v súlade so Študijným poriadkom UCM v Trnave, odovzdanie príslušného zadania z každej hodiny.

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 % >.

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. Sprostredkovanie nových vedomostí študentom z oblasti molekulových základov vývoja nových materiálov a liečiv s využitím moderných metód počítačom podporovaného projektovania molekúl (CAMD).
2. Hľadanie zlúčenín s potenciálnym terapeutickým účinkom, ktoré spĺňajú požadované kritériá (vysoká účinnosť a špecificita, minimálna toxicita, dobrá biologická dostupnosť).
3. Využitie počítačov, informatiky, štatistiky, matematiky.

4. Využitie počítačov, chémie.
5. Využitie počítačov, fyziky.
6. Využitie počítačov, biológie a medicíny.
7. Využitie počítačovej grafiky na zobrazovanie a manipuláciu s chemickými štruktúrami s cieľom syntézy "in silico" nových molekúl,
8. Využitie počítačovej grafiky na zobrazovanie a manipuláciu s chemickými štruktúrami s cieľom syntézy "in silico" nových molekúl určenia ich konformácie a odhadu podobnosti (alebo nepodobnosti) súboru zlúčenín.
9. Výpočet interakčnej energie medzi molekulami liečiva a hypotetickými alebo experimentálne zistenými štruktúrami makromolekúl (receptory).
10. Objasnenie procesov rozpoznávania „ligandov“ na molekulovej úrovni
11. Stimulácia kreativity výskumu a vývoja nových molekúl.
12. Záverečný test.

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.
- A. Nag, B. Dey, Computer-Aided Drug Design and Delivery Systems, The McGraw-Hill, 2011.

Jazyk, ktorého znalosť je potrebná na absolvovanie predmetu

1. slovenský jazyk
2. anglický jazyk

Poznámky

- Povinný predmet.
- 3 hodiny seminárov týždenne.
- Vzdelávacia činnosť sa uskutočňuje prezenčnou metódou.