عنوان درس به فارسی:	طراحی محاسباتی دارو		
عنوان درس به انگلیسی:	Computational Drug Design	نوع درس و واحد	
دروس پیش‌نیاز:	-	پایه ☐	نظری ■
دروس هم‌نیاز:	-	تخصصی اجباری ☐	عملی ☐
تعداد واحد: ۳		تخصصی اختیاری ■	نظری-عملی ☐
تعداد ساعت: ۴۸		رساله / پایان‌نامه ☐	

نوع آموزش تکمیلی عملی (در صورت نیاز): سفر علمی ☐ آزمایشگاه ☐ سمینار ☐ کارگاه ■ موارد دیگر: .....

هدف کلی: آشنایی اصول محاسباتی دارو، طراحی ساختارهای شیمیایی، مدلسازی ملکولی با استفاده از محاسبات رایانه ای

اهداف ویژه: به کاربردن ابزارهای تکنولوژیکی در بررسی برهمکنش های دارو با گیرنده‌های زیست و تسریع فرآیند کشف دارو

کاربرد : بررسی برهم کنش دارو با گیرنده‌های زیستی

پ) مباحث یا سرفصل‌ها: (۸ تا ۱۲ مورد را ذکر نمایید)

- داروسازی محاسباتی و اهمیت آن در فرآیند کشف دارو
- مبانی تئوری روش‌های رایانه ای طراحی دارو
- اصول اولیه رسم ساختارهای شیمیایی و معرفی نرم افزار Chemoffice و کاربرد آن در طراحی مواد دارویی
- آشنایی با بانک های اطلاعاتی حاوی ساختارهای شیمیایی و دارویی نظیر ZINC، PubChem، Chemspider، ..
- معرفی و شناخت ساختارهای پروتئینی و پپتیدی و آشنایی با نحوه استفاده از بانک اطلاعات پروتئین PDB
- مقدمه بر نرم افزارهای مدل سازی ملکولی و معرفی بسته های کشف دارو مورد استفاده Auto dock، Schrödinger، MOE و Sybel
- نحوه آماده سازی پروتئین و ساختارهای شیمیایی به منظور داکینگ ملکولی و نحوه انجام آن
- تحلیل نتایج حاصل از مدلسازی ملکولی و ارائه مدل های دو بعدی و سه بعدی بر هم کنش بین دارو و گیرنده‌های زیستی
- محاسبات اصول لیپینسکی و بررسی سمیت ملکولی به روش محاسباتی
- مقدمه بر مبحث ساختار فعالیت زیستی و ارائه روش‌های انجام QSAR دو بعدی و سه بعدی
- مقدمه بر شیمی محاسباتی کوانتمی و معرفی نرم افزارهای Gausview و Gaussian

ت) راهبردهای تدریس و یادگیری متناسب با محتوا و هدف:

ریس تئوری مباحث پیشنهادی، کارگاه نرم‌افزاری، تعیین موضوعات پروژه

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت‌های کلاسی در طول نیم‌سال ۲۰ درصد آزمون پایان نیم‌سال ۳۰ درصد پروژه نهایی و ارائه آن ۵۰ درصد

ج) ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

لپ تاب- نرم افزارهای تخصصی

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

[۱] کاربرد شبیه¬سازی مولکولی در طراحی دارو ؛ کمال اسمری، یاسمن تمدن، صمدنژادابراهیمی-انتشارات دانشگاه شهیدبهشتی ۱۴۰۰

[۲] Strømgaard, Kristian, Povl Krogsgaard-Larsen, and Ulf Madsen, eds. Textbook of drug design and discovery. CRC press, ۲۰۱۷.

[۳] Gore, Mohini, and Umesh B. Jagtap, eds. Computational drug discovery and design. Humana Press, ۲۰۱۸.