

عنوان درس به فارسی:	طراحی محاسباتی دارو	عنوان درس به انگلیسی:	نوع درس و واحد
دروس پیش‌نیاز:	-	Computational Drug Design	<input checked="" type="checkbox"/> نظری <input type="checkbox"/> عملی
دروس هم‌نیاز:	-		<input type="checkbox"/> تخصصی اجباری <input checked="" type="checkbox"/> تخصصی اختیاری
تعداد واحد:	۳		<input checked="" type="checkbox"/> نظری-عملی
تعداد ساعت:	۴۸		<input type="checkbox"/> 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 رایانه‌ای

اهداف ویژه: به کاربردن ابزارهای تکنولوژیکی در بررسی برهمنکنش‌های دارو با گیرنده‌های زیستی و تسریع فرآیند کشف دارو

کاربرد: بررسی برهمنکنش 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 رایانه‌ای طراحی دارو

- اصول اولیه رسم ساختارهای شیمیایی و معرفی نرم افزار Chemoffice و کاربرد آن در طراحی مواد دارویی

- آشنایی با بانک‌های 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 مدل‌سازی ملکولی و معرفی بسته‌های کشف دارو مورد استفاده Auto dock، Schrödinger، MOE، Sybel

- نحوه آماده سازی پروتئین و ساختارهای شیمیایی به منظور داکینگ ملکولی و نحوه انجام آن

- تحلیل نتایج حاصل از مدلسازی ملکولی و ارائه مدل‌های 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 کوانتومی و معرفی نرم افزارهای Gaussian و Gausview

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

ریس تئوری مباحث پیشنهادی، کارگاه نرم‌افزاری، تعیین موضوعات پژوهش

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

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

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

لپ تاپ - نرم افزارهای تخصصی

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

[۱] کاربرد شیمی-سازی مولکولی در طراحی دارو؛ کمال اسمیری، یاسمن تمدن، صمدنژاد ابراهیمی-انتشارات دانشگاه شهید بهشتی

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.

