

بنام خدا

موضوع تدریس: شیمی دارویی پیشرفته عملی

مدت تدریس: ۳۴ ساعت (۱۰ جلسه ۳ ساعته) گروه هدف: دانشجویان تخصصی شیمی دارویی PhD

پیش‌نیاز: شیمی دارویی پیشرفته ۱ نظری نوع واحد: عملی تعداد واحد: ۱ واحد محل اجرا: دانشکده داروسازی

مدرسین: دکتر هادی زاده، دکتر شمس آرا،

هدف کلی

کسب دانش و مهارت در علم کاربرد کامپیوتر در طراحی داروها

اهداف اختصاصی

دانشجویان پس از طی دوره بتوانند:

۱. با نرم افزار های مطرح در طراحی دارو کار بکنند

۲. هدایت و انجام پروژه های تحقیقاتی در زمینه طراحی داروها هستند

فهرست محتوا و ترتیب ارائه درس

جلسات	عناوین	استاد
سه جلسه	QSAR و 3D-QSAR و آشنایی با نرم افزار SYBYL	دکتر شمس آرا
دو جلسه	اصول داکینگ و آشنایی با نرم افزار های AutoDock و VinaDock و MOE	دکتر هادی زاده
دو جلسه	همولوژی مدلینگ و آشنای با نرم افزار Modeller	دکتر هادی زاده
یک جلسه	آشنایی با سایت PDB و uniport	دکتر هادی زاده
دو جلسه	انجام محاسبات دینامیک مولکولی و کار با نرم افزار namd	دکتر هادی زاده

روش تدریس

کنفرانس و کارگاه عملی

وظایف و تکالیف دانشجوی

حضور فعال در کلاس ها و مشارکت در بحث ها

ارزشیابی روش دانشجو

- انجام پروژه ۲۰٪

- امتحان پایان ترم به صورت عملی ۸۰٪

منابع مطالعه

1- Anne- Mar Sapseie, Molecular orbital calculations of biological systems, Oxford University Press (Last Edition)

2- P.M. Dean Molecular Similarity in drug design, Blackie Academic & Professional (Last Edition)

Namd tutorials: <http://www.ks.uiuc.edu/Training/Tutorials/namd-index.html>

Autodock tutorials: <http://autodock.scripps.edu/faqs-help/tutorial>

Modeller Tutorials: <https://salilab.org/modeller/tutorial/>