نام درس به فارسی: طراحی محاسباتی دارو

نام درس به انگلیسی: Computational Drug Design

تعداد واحد: ۲ واحد

تعداد ساعت: ۳۲

نوع واحد: نظری

نوع درس: اختیاری

پیشنیاز: ندارد

آموزش تکمیلی عملی: دارد□ ندارد■ سفر علمی□ کارگاه□ آزمایشگاه□ سمینار■

اهدف کلی درس:

هدف از این درس آشنایی با طراحی دارو با استفاده ازانواع روشهای محاسباتی است.

سرفصل:

۱- تعریف دارو و گیرنده آن

۲- تاریخچه و کشف داروهای جدید

۳- مراحل توسعهٔ یک داروی جدید

۴- مشکل عمده در فرآیند کشف دارو

۵- فرایند طراحی دارو

۶- طراحی دارو بر اساس لیگاند

۷- طراحی دارو بر اساس ساختار هدف

۸- ابزارها و تکنیک های محاسباتی: (مدلسازی همولوژی، مکانیک مولکولی، تاخوردگی پروتئین، داکینگ، مدل های فارماکوفور، QSAR، 3D-QSAR، شیمی انفورماتیک)

۹- ADMET

۱۰- غربالگری مجازی (Virtual screening).

۱۱- طراحی دارو بر اساس قطعات مولکولی (Fragment-based drug design)

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون های نهایی	پروژه
۲۰	۲۰	آزمون های نوشتاری ۳۰	۳۰
		عملکردی	

فهرست منابع:

1- Young D.C. Computational Drug Design: A Guide for Computational and Medicinal Chemists. Wiley-Interscience. 2009

2- Bultinck P., Tollenaere J.P., Langenaeker W., Winter H.D. Computational Medicinal Chemistry for Drug Discovery. CRC. 2003.

3- Zheng, Y., Rational Drug Design Methods and Protocols, Springer. 2012.

4- Tari, L. W. Structure-Based Drug Discovery, Springer. 2012.