

ترم : سوم
محل برگزاری: دانشکده داروسازی

رشته و مقطع تحصیلی : شیمی دارویی- دکتری تخصصی
روز و ساعت برگزاری : دوشنبه - ساعت ۱۶-۱۴
دروس پیش نیاز : -
شماره تماس دانشکده: ۳۳۳۷۲۲۵۰-۲ داخلی ۱۴۸

نام و کد درس : شیمی محاسباتی و طراحی مولکولی (کد ۲۰)
نیمسال اول / دوم / تابستان: اول
تعداد و نوع واحد (نظری) : ۱/۵ واحد- نظری
مدرس یا مدرسین: دکتر سیاوش دستمالچی

جلسه اول

هدف کلی : پیش بینی ساختار سه بعدی پروتئین ها

اهداف اختصاصی	حیطه های اهداف	فعالیت استاد	فعالیت دانشجو	عرصه یادگیری	زمان	رسانه کمک آموزشی	روش ارزیابی
انتظار می رود در پایان جلسه دانشجویان : ۱- درک صحیحی از نیاز به پیش بینی ساختار سه بعدی پروتئین ها کسب نمایند. ۲- ارتباط تکاملی و حفاظت ساختار سه بعدی در پروتئین ها بدانند. ۳- روش های پیش بینی ساختار سه بعدی پروتئین ها را بدانند	شناختی شناختی	سخنرانی و تشویق دانشجویان برای مشارکت بیشتر	شرکت فعال در کلاس و مشارکت در بحث	کلاس درس	۳۰ دقیقه ۹۰ دقیقه	ویدیو پروژکتور (powerpoint) و وایت برد	امتحان پایان ترم

✱ سیاست مسئول دوره در مورد برخورد با غیبت و تاخیر دانشجو در کلاس درس : گزارش به اداره آموزش

✱ نحوه ارزشیابی دانشجو و بارم مربوط به هر ارزشیابی :

الف) در طول دوره (امتحان میان ترم) : ----- بارم : -----

ب) پایان دوره : تشریحی

منابع اصلی درس(رفرانس):

Related scientific articles

Prediction of protein structures, functions and interactions 2009 – Bujnicki

Protein Structure Determination, Analysis, and Applications for Drug Discovery 2003 - Chasman

جلسه دوم

هدف کلی : پیش بینی ساختار سه بعدی پروتئین ها به روش هومولوژی (همردیفی توالی ها بصورت سرتاسری)

اهداف اختصاصی	حیطه های اهداف	فعالیت استاد	فعالیت دانشجو	عرصه یادگیری	زمان	رسانه کمک آموزشی	روش ارزیابی
انتظار می رود در پایان جلسه دانشجو بتواند : ۱- کلیات مدلبندي مولکولي پروتئين ها ۲- کلیات همردیفی ۳- کاربرد همردیفی در بیوانفورماتیک و طراحی دارو ۴- اساس و قوانین همردیفی را شرح دهد.	شناختی شناختی شناختی	سخنرانی و تشویق دانشجویان برای مشارکت بیشتر	شرکت فعال در کلاس و مشارکت در بحث	کلاس درس	۴۰ دقیقه ۴۰ دقیقه ۴۰ دقیقه	ویدیو پروژکتور (powerpoint) و وایت بورد	امتحان پایان ترم

جلسه سوم

هدف کلی : پیش بینی ساختار سه بعدی پروتئین ها به روش هومولوژی (ماترس های امتازدهی در همردیفی)

اهداف اختصاصی	حیطه های اهداف	فعالیت استاد	فعالیت دانشجو	عرصه یادگیری	زمان	رسانه کمک آموزشی	روش ارزیابی
انتظار می رود در پایان جلسه دانشجو بتواند : ۱- انواع جداول امتیازدهی را بشناسد. ۲- منشع دستیابی به جداول امتیازدهی را بداند. ۳- نحوه استفاده از جداول امتیازدهی را بداند	شناختی	سخنرانی و تشویق دانشجویان برای مشارکت بیشتر	شرکت فعال در کلاس و مشارکت در بحث	کلاس درس	۱۲۰ دقیقه	ویدیو پروژکتور (powerpoint) و وایت بورد	امتحان پایان ترم

جلسه چهارم

هدف کلی : پیش بینی ساختار سه بعدی پروتئین ها به روش هومولوژی (همردیفی منطقه ای - روشهای جستجوی بانکهای توالی)

اهداف اختصاصی	حیطه های اهداف	فعالیت استاد	فعالیت دانشجو	عرصه یادگیری	زمان	رسانه کمک آموزشی	روش ارزیابی
انتظار می رود در پایان جلسه دانشجو بتواند : ۱- انواع هم ردیفی: BLAST و FAST و ... را توضیح دهد. ۲- همردیفی dot plot را بداند. ۳- سایتهای انجام همردیفی را بشناسد.	شناختی	سخنرانی و تشویق دانشجویان برای مشارکت بیشتر	شرکت فعال در کلاس و مشارکت در بحث	کلاس درس	۱۲۰ دقیقه	ویدیو پروژکتور (powerpoint) و وایت برد	امتحان پایان ترم

جلسه پنجم

هدف کلی : پیش بینی ساختار سه بعدی پروتئین ها به روش هومولوژی (هم ردیفی چند گانه و انجام هم ردیفی با کامپیوتر)

اهداف اختصاصی	حیطه های اهداف	فعالیت استاد	فعالیت دانشجو	عرصه یادگیری	زمان	رسانه کمک آموزشی	روش ارزیابی
انتظار می رود در پایان جلسه دانشجو بتواند : ۱- کلیات هم ردیفی چند گانه را توضیح دهد. ۲- با نرم افزار های هم ردیفی آشنا گردد.	شناختی مهارتی	سخنرانی و تشویق دانشجویان برای مشارکت بیشتر	شرکت فعال در کلاس و مشارکت در بحث و کار با کامپیوتر و نرم افزار های مختلف	کلاس درس و اتاق کامپیوتر	۶۰ دقیقه ۶۰ دقیقه	ویدیو پروژکتور (powerpoint) و وایت بورد	امتحان پایان ترم

جلسه ششم

هدف کلی : آشنایی با جستجوی ساختارهای پروتئینی برای دستیابی و انتخاب به الگوی مناسب

اهداف اختصاصی	حیطه های اهداف	فعالیت استاد	فعالیت دانشجو	عرصه یادگیری	زمان	رسانه کمک آموزشی	روش ارزیابی
انتظار می رود در پایان جلسه دانشجو بتواند : ۱- با استفاده از مطالب جلسات قبل نحوه پیدا کردن الگوی مناسب (template) برای مدلندی را بداند. ۲- همدیفی توالی پروتئین هدف (target) و الگو (template) را انجام دهد. ۳- روشهای بهبود همدیفی توالی پروتئین هدف (target) و الگو (template) را بداند. ۴- استفاده از روشهای profiling در همدیفی را بداند.	شناختی مهارتی	سخنرانی و تشویق دانشجویان برای مشارکت بیشتر و کار با کامپیوتر	شرکت فعال در کلاس و مشارکت در بحث و کار با کامپیوتر و نرم افزار های مختلف	کلاس درس و اتاق کامپیوتر	۶۰ دقیقه ۶۰ دقیقه	ویدیو پروژکتور (powerpoint) و وایت برد	امتحان پایان ترم

جلسه هفتم

هدف کلی : آشنایی با روش های ایجاد مدل ساختارهای پروتئینی

اهداف اختصاصی	حیطه های اهداف	فعالیت استاد	فعالیت دانشجو	عرصه یادگیری	زمان	رسانه کمک آموزشی	روش ارزیابی
انتظار می رود در پایان جلسه دانشجو بتواند : ۱- روش مدل بندی براساس rigid body assembly را بداند. ۲- روش مدل بندی براساس spatial restraint را بداند. ۳- روش مدل بندی نواحی loop در ساختار پروتئین ها را بداند. ۴- نحوه پیش بینی کنفورماسیون بخش side chain پروتئین را بداند.	شناختی مهارتی	سخنرانی و تشویق دانشجویان برای مشارکت بیشتر و کار با کامپیوتر	شرکت فعال در کلاس و مشارکت در بحث و کار با کامپیوتر و نرم افزار های مختلف	کلاس درس و اتاق کامپیوتر	۶۰ دقیقه ۶۰ دقیقه	ویدیو پروژکتور (powerpoint) و وایت برد	امتحان پایان ترم

جلسه هشتم

هدف کلی : آشنایی با روش های ایجاد مدل ساختارهای پروتئینی به روش threading و inverse protein folding

اهداف اختصاصی	حیطه های اهداف	فعالیت استاد	فعالیت دانشجو	عرصه یادگیری	زمان	رسانه کمک آموزشی	روش ارزیابی
انتظار می رود در پایان جلسه دانشجو بتواند : ۱- مفهوم مدل بندی بر اساس threading را بداند. ۲- مفهوم inverse protein folding را بداند. ۳- با اساس ایجاد جدول امتیاز دهی بر مبنای ویژگی های سه بعدی (environmental properties) آشنا شوند. ۴- روش Profiles-3D را بداند. ۵- روش Threader را بداند	شناختی مهارتی	سخنرانی و تشویق دانشجویان برای مشارکت بیشتر	شرکت فعال در کلاس و مشارکت در بحث و کار با کامپیوتر و نرم افزار های مختلف	کلاس درس و اتاق کامپیوتر	۱۲۰ دقیقه	ویدیو پروژکتور (powerpoint) و وایت بورد	امتحان پایان ترم

جلسات نهم و دهم

هدف کلی : آشنایی با روش های ایجاد ارزیابی و اعتباربخشی مدل ساختاری پروتیین ها

اهداف اختصاصی	حیطه های اهداف	فعالیت استاد	فعالیت دانشجو	عرصه یادگیری	زمان	رسانه کمک آموزشی	روش ارزیابی
انتظار می رود در پایان جلسه دانشجو بتواند : ۱- روش ارزیابی geometry و stereochemistry مدل را بداند. ۲- با نرم افزارهای ProCheck و Whatlf و پارامترهای ارزیابی آشنا باشد. ۳- با ارزیابی های spatial و environmental آشنا باشد. ۴- با نرم افزارهای ANOLEA، VERIFY-3D، ANOLE، و QMEAN آشنا باشد.	شناختی مهارتی	سخنرانی و تشویق دانشجویان برای مشارکت بیشتر	شرکت فعال در کلاس و مشارکت در بحث و کار با کامپیوتر و نرم افزار های مختلف	کلاس درس و اتاق کامپیوتر	۱۲۰ دقیقه	ویدیو پروژکتور (powerpoint) و وایت بورد	امتحان پایان ترم

جلسات یازدهم و دوازدهم

هدف کلی : آشنایی با روش های Molecular Docking

اهداف اختصاصی	حیطه های اهداف	فعالیت استاد	فعالیت دانشجو	عرصه یادگیری	زمان	رسانه کمک آموزشی	روش ارزیابی
انتظار می رود در پایان جلسه دانشجو: ۱- مفهوم و اساس Molecular Docking را بدانند. ۲- database های قابل جستجوی مولکولهای کوچک را بشناسند. ۳- با کاربردهای Molecular Docking مثل طراحی دارو آشنا باشد. ۴- انواع روش های جستجو در Molecular Docking مثل genetic algorithm، Monte، simulated annealing و Carlo molecular dynamics را بدانند. ۵- انواع روش های امتیازدهی مانند Empirical، Force Field و Knowledge-based در Molecular Docking را بدانند. ۶- با نرم افزارهایی مثل FLEXX، DOCK، ockAutoD، GOLD آشنا باشد.	شناختی مهارتی	سخنرانی و تشویق دانشجویان برای مشارکت بیشتر	شرکت فعال در کلاس و مشارکت در بحث و کار با کامپیوتر و نرم افزار های مختلف	کلاس درس و اتاق کامپیوتر	۲ x ۱۲۰ دقیقه	ویدیو پروژکتور (powerpoint) و وایت بورد	امتحان پایان ترم

جلسات یازدهم و دوازدهم

هدف کلی : آشنایی با روش های QSAR

اهداف اختصاصی	حیطه های اهداف	فعالیت استاد	فعالیت دانشجو	عرصه یادگیری	زمان	رسانه کمک آموزشی	روش ارزیابی
انتظار می رود در پایان جلسه دانشجو: ۱- مفهوم و اساس QSAR را در drug design بداند. ۲- اساس برقراری ارتباط کمی بین ساختار شیمیایی و اثر بیولوژیک را بداند. ۳- با OECD guidelines آشنا باشد. ۴- ویژگی های data set مورد استفاده در QSAR را بداند. ۵- انواع مفسر های مولکولی (Molecular descriptors) را بداند. ۶- چگونگی آماده سازی داده های بیولوژیک و مفسر های مولکولی را بداند. ۷- انواع روش های ایجاد مدل های ریاضی QSAR را بداند. ۸- روش های اعتبارسنجی مدل های QSAR را بداند. ۹- با نرم افزار های آنالیز های QSAR آشنا باشد.	شناختی مهارتی	سخنرانی و تشویق دانشجویان برای مشارکت بیشتر	شرکت فعال در کلاس و مشارکت در بحث و کار با کامپیوتر و نرم افزار های مختلف	کلاس درس و اتاق کامپیوتر	۲ x ۱۲۰ دقیقه	ویدیو پروژکتور (powerpoint) و وایت بورد	امتحان پایان ترم