

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: ۲-۳۳۳۷۲۲۵۰ 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 مدل بندی مولکولی پروتئین 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 برد | 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 |
|--|----------------|---|-----------------------------------|--------------|-----------|---|------------------|
| <p>انتظار می رود در پایان جلسه دانشجو بتواند :</p> <p>۱- انواع جداول امتیازدهی را بشناسد.</p> <p>۲- منشع دستیابی به جداول امتیازدهی را بداند.</p> <p>۳- نحوه استفاده از جداول امتیازدهی را بداند</p> | 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 بورد | 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 برد | 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 |
|---|------------------|---|---|--------------------------|----------------------|--|------------------|
| <p>انتظار می رود در پایان جلسه دانشجو بتواند :</p> <p>۱- با استفاده از مطالب جلسات قبل نحوه پیدا کردن الگوی مناسب (template) برای مدل‌بندی را بداند.</p> <p>۲- هم‌ردیفی توالی پروتئین هدف (target) و الگو (template) را انجام دهد.</p> <p>۳- روشهای بهبود هم‌ردیفی توالی پروتئین هدف (target) و الگو (template) را بداند.</p> <p>۴- استفاده از روشهای profiling در هم‌ردیفی را بداند.</p> | 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 |
|--|----------------|---|---|--------------------------|----------------------|---|------------------|
| <p>انتظار می رود در پایان جلسه دانشجو بتواند :</p> <p>۱- روش مدلندی براساس rigid body assembly را بداند.</p> <p>۲- روش مدلندی براساس spatial restraint را بداند.</p> <p>۳- روش مدلندی نواحی loop در ساختار پروتئین ها را بداند.</p> <p>۴- نحوه پیش بینی کنفورماسیون بخش side chain پروتئین را بداند.</p> | 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 بورد | 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 |
|---|------------------|--|--|-----------------------------|-----------|---|------------------|
| <p>انتظار می رود در پایان جلسه دانشجو بتواند :</p> <ol style="list-style-type: none"> ۱- مفهوم مدل‌بندی 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 |
|--|----------------|---|---|--------------------------|-----------|---|------------------|
| <p>انتظار می رود در پایان جلسه دانشجو بتواند :</p> <p>۱- روش ارزیابی geometry و stereochemistry مدل را بداند.</p> <p>۲- با نرم افزارهای ProCheck و Whatlf و پارامترهای ارزیابی آشنا باشد.</p> <p>۳- با ارزیابی های spatial و environmental آشنا باشد.</p> <p>۴- با نرم افزارهای ANOLEA، VERIFY-3D، ANOLE، و QMEAN آشنا باشد.</p> | 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 |
|---|----------------|---|---|--------------------------|---------------|---|------------------|
| <p>انتظار می رود در پایان جلسه دانشجو:</p> <p>۱- مفهوم و اساس Molecular Docking را بداند.</p> <p>۲- database های قابل جستجوی مولکولهای کوچک را بشناسد.</p> <p>۳- با کاربردهای Molecular Docking مثل طراحی دارو آشنا باشد.</p> <p>۴- انواع روش های جستجو در Molecular Docking مثل genetic algorithm، simulated annealing، Monte Carlo و molecular dynamics را بداند.</p> <p>۵- انواع روش های امتیازدهی مانند Empirical، Force Field و Knowledge-based در Molecular Docking را بداند.</p> <p>۶- با نرم افزارهایی مثل FLEXX، DOCK، GOLD، ockAutoD آشنا باشد.</p> | 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 |
|---|----------------|---|---|--------------------------|---------------|---|------------------|
| <p>انتظار می رود در پایان جلسه دانشجو:</p> <ol style="list-style-type: none"> 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 |