Ders İzlencesi

Ders Kodu - Ders Adı	**ECZ887 - Bilgisayar Destekli İlaç Tasarımı**
Ders Türü	X.Yarıyıl
Teori + Uygulama	1+0
AKTS	**1.5**
Ders Dili	Türkçe
Ders Türü	Uzmanlık Alanı Dersleri
Öğretim Elemanları	DOÇ. DR. ASİYE MERİÇ

Dersin Veriliş Biçimi	Bu ders sadece yüz yüze eğitim şeklinde yürütülmektedir.
Önkoşullar	Bu dersi alacak öğrenciler, Farmasötik Kimya derslerinde verilen temel Bilgileri, Yapı-Etki İlişkileri kavramını biliyor olmalıdır. 2 veya 3 Boyutlu kimyasal çizim programlarını biliyor ve kullanılıyor olmak, bilgisayar konusunda ilgili olmak, dersin daha kolay anlaşılması ve başarılmasında etkili olacağı savunulmaktadır.
Önerilen Dersler	Bu dersi alacak öğrencilerin en az ECZ301-Farmasötik Kimya I ve ECZ302-Farmasötik Kimya II derslerini almış ve başarmış olmaları gerekmektedir.
Önerilen Kaynaklar	- İlaç Araştırmalarında Moleküler Modelleme konuları ile ilgili tüm bilimsel makaleler (SciFinder ve Web of Science veri tabanları ile ulaşılabilir)-MOE yazılım paketi (https://www.chemcomp.com)-Schrodinger Eğitim Suitleri (https://www.schrodinger.com)- Merck Index- RxMediaPharma® 2018 İnteraktif İlaç Bilgi Kaynağı, Genel Editör: Prof. Dr. Levent Üstünes.
Staj & Uygulama	Dersler, ilk haftalarda temel bilgilerin verilmesinden sonra bilgisayar başında uygulamalı olarak yapılacaktır. Öğrencilerin taşınabilir bilgisayarlarının olması önerilmektedir. Kendilerinin de ücretsiz bazı programları bilgisayarlarına indirip üzerlerinde araştırma yapabilmeleri beklenmektedir.

Ders İzlencesi

Haftalar	Öğrenme Çıktıları	Konular	Öğretim Yöntemleri
1. hafta		Farmasötik ve Medisinal Kimyada Bilgisayar Metotlar, İlaç Tasarımındaki Yeri ve Önemi	
2. hafta		Farmasötik ve Medisinal Kimyada Bilgisayar Metotlar, İlaç Tasarımındaki Yeri ve Önemi	
3. hafta		Ligand’a Dayalı Tasarım: Geleneksel (2 boyutlu), Farmakofor analizi,	
4. hafta		3 Boyutlu (CoMFA- CoMSIA metodları),	
5. hafta		3 Boyutlu (CoMFA- CoMSIA metodları),	
6. hafta		4-, 5- ve 6- boyutlu kantitatif yapı etki ilişkileri;	
7. hafta		Yapı (Reseptör)’e Dayalı Tasarım: Moleküler modelleme,	
8. hafta		Yapı (Reseptör)’e Dayalı Tasarım: Moleküler modelleme,	
9. hafta		Doking ve görüntüleme, Moleküler mekanik ve dinamik yöntemleri,	
10. hafta		Sanal ortamda ilaç adayı moleküllerin ön elemesi, Farmokolojik modelleme,	

Ders İzlencesi

Haftalar	Öğrenme Çıktıları	Konular	Öğretim Yöntemleri
11. hafta		Sanal ortamda ilaç adayı moleküllerin ön elemesi, Farmokolojik modelleme,	
12. hafta		Aday ilaç moleküllerinin ayrıntılı bilgilerini içeren veri bankalarını kullanma ve oluşturma, Yüksek çıktılı tarama,	
13. hafta		de novo (sentetik) ilaç tasarımı,	
14. hafta		İlaç hedefleri olarak enzim inhibitörlerinin bilgisayar destekli tasarımı.	

Öğrenme Çıktıları

#	Öğrenme Çıktıları
1	Farmasötik ve Medisinal Kimyada Bilgisayar Metodları tanımlayıp karşılaştırabilecektir
2	Etki gösteren moleküllerin yapısından hareketle, reseptör yapısını yorumlayabilecektir.
3	Farmakofor Analizi geliştirebilecektir.
4	Bilinen reseptör yapısından hareketle, etki gösterebilecek molekülleri tasarlayabilecektir
5	Farmokolojik modelleme (istenilen farmokolojik (hidrofobisite, hidrojen bağı kurma gibi) özelliklere sahip ilacın moleküler bir modelinin geliştirilmesi ve bu modele en uygun olan doğadaki ilaç molekülünün aranıp bulunması) geliştirebilecektir.

Sürdürülebilir Kalkınma Amaçları

İçerik girilmemiştir.

Dersin Teması

İçerik girilmemiştir.

AKTS İş Yükü

Etkinlik	Süre (Saat)	Sayı	İş Yükü
Teorik Derse Katılım	0	0	0
Sınıf Dışı Çalışma (Ön Hazırlık & Pekiştirme Amaçlı)	0	0	0
Ödevler	0	0	0
Proje - Rapor - Sunum Hazırlama	0	0	0
Ara Sınav Hazırlığı (sınav süresi dahil)	0	0	0
Final Sınavı Hazırlığı (sınav süresi dahil)	0	0	0
Uygulama (Laboratuvar, Müzik/Enstrüman Uygulaması, Atölye/Saha Çalışması vb.)	0	0	0
Staj Uygulaması	0	0	0
		Hesaplanan AKTS	**0**

Ölçme ve Değerlendirme

İçerik girilmemiştir.