Ders İzlencesi

Ders Kodu - Ders Adı	**FKM534 - Medisinal Kimyada Moleküler Docking ve Dinamik Simülasyonu**
Ders Türü	II.Yarıyıl
Teori + Uygulama	3+0
AKTS	**6.0**
Ders Dili	Türkçe
Ders Türü	Seçmeli Dersler
Öğretim Elemanları	DOÇ. DR. BEGÜM NURPELİN SAĞLIK ÖZKAN

Dersin Veriliş Biçimi	Bu ders sadece yüz yüze eğitim şeklinde yürütülmektedir.
Önkoşullar	Bu dersin ön koşulu ya da eş koşulu bulunmamaktadır.
Önerilen Dersler	Bu dersle ilişkili önerilen başka dersler bulunmamaktadır.
Önerilen Kaynaklar	Bu dersle ilişkili zorunlu ya da önerilen kaynaklar bulunmamaktadır.
Staj & Uygulama	Staj yoktur.

Ders İzlencesi

Haftalar	Öğrenme Çıktıları	Konular	Öğretim Yöntemleri
1. hafta		Moleküler modellemeye giriş	
2. hafta		Moleküler modelleme yaklaşımları	
3. hafta		İlaç tasarımında moleküler modelleme uygulamaları ve örnekleri	
4. hafta		Medisinal kimyada kullanılan programların tanımlanması ve kullanılışları	
5. hafta		Kimyasal bileşiklerin 2-boyutlu ve 3-boyutlu gösterimi	
6. hafta		Protein data bankası ve proteinlerin gösterimi ile ilgili çalışmalar	
7. hafta		Moleküler docking için yapılması gereken ön çalışmalar	
8. hafta		Moleküler docking çalışmaları	
9. hafta		Moleküler docking çalışmalarının değerlendirilmesi	
10. hafta		Moleküler dinamik programlarının ilaç geliştirmede kullanılması	
11. hafta		Moleküler dinamik simülasyonu için yapılması gereken ön çalışmalar	
12. hafta		Moleküler dinamik simülasyonları	
13. hafta		Moleküler dinamik simülasyonlarının değerlendirilmesi	
14. hafta		Moleküler docking ve dinamik simülasyonu için uygulamalar	

Öğrenme Çıktıları

#	Öğrenme Çıktıları

Öğrenme Çıktıları

#	Öğrenme Çıktıları
1	Medisinal kimyada bilgisayar uygulamalarında kullanılacak temel bilgileri öğrenir.
2	İlaç etken madde geliştirme çalışmaları içerisinde, medisinal kimya kapsamındaki temel bilgileri kazanır.
3	İlaç-enzim etkileşmelerini inceler.
4	Konformasyonel analizleri öğrenir.
5	Reseptör-substrat modellemesini analiz eder.
6	İlaç etken maddelerinin yapıları ile olası biyolojik aktiviteleri arasında bilgisayar destekli bağlantı kurar.
7	İlaç etken maddelerinin yapıları ile olası biyolojik aktiviteleri arasında bilgisayar destekli bağlantı kurar.
8	Bilgisayar destekli ilaç tasarım yöntemlerini öğrenir.
9	Yeni ilaç etken madde tasarımı, kantitatif yapı-etki ilişkileri ve bu süreçte bilgisayar uygulamaları bilgilerini kazanır.
10	İlaç etken maddelerinin kantitatif ve biyolojik analiz sonuçlarının istatiksel değerlendirilmesi ile ilgili bilgileri edinir.
11	Moleküler docking çalışmalarını yürütür ve ilgili sonuçları analiz eder.
12	Moleküler dinamik simülasyonu deneyimler ve ilgili sonuçları analiz eder.

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.