Ders İzlencesi

Ders Kodu - Ders Adı	**FKM629 - İlaç Araştırmalarında Moleküler Modelleme**
Ders Türü	II.Yarıyıl
Teori + Uygulama	3+0
AKTS	**7.5**
Ders Dili	Türkçe
Ders Türü	Seçmeli Dersler
Öğretim Elemanları	DOÇ. DR. ASAF EVRİM EVREN

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 yapılacağından kontenjan sınırlaması vardır. 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		İlaç araştırmalarında önder yapının geliştirilmesi, optimizasyonu ve ilaç hâline getirilmesinde kullanılan bilgisayar teknikler	
2. hafta		İlaç araştırmalarında önder yapı'nın geliştirilmesi, optimizasyonu ve ilaç haline getirilmesinde kullanılan bilgisayar teknikler	
3. hafta		Moleküler modelleme	
4. hafta		Moleküllerin görüntülenmesi için geliştirilmiş paket programların kullanımı	
5. hafta		Moleküllerin görüntülenmesi için geliştirilmiş paket programların kullanımı	
6. hafta		Matematiksel yöntemlerle moleküler düzeyde model oluşturma	
7. hafta		Moleküller arası etkileşimlerin tanımı	
8. hafta		Simülasyon teknikleri (Moleküler Dinamik)	
9. hafta		Simülasyon teknikleri (Monte Carlo)	

Ders İzlencesi

Haftalar	Öğrenme Çıktıları	Konular	Öğretim Yöntemleri
10. hafta		Simulation techniques (Energy minimization)	
11. hafta		Karşılaştırmalı modelleme	
12. hafta		İlaç tasarımı	
13. hafta		İlaç tasarımı	
14. hafta		Kemoinformatik	

Öğrenme Çıktıları

#	Öğrenme Çıktıları
1	İlaç araştırmalarında önder yapı geliştirebilecek, optimizasyonunu sağlayabilecektir.
2	Moleküler modellemeyi açıklayabilecektir.
3	Moleküllerin görüntülenmesi için geliştirilmiş paket programları kullanabilecektir.
4	Matematiksel yöntemlerle moleküler düzeyde model oluşturmayı tasarlayıp uyarlayabilecektir.
5	Moleküller arası etkileşimleri karşılaştırabilecektir.
6	Simülasyon teknikleri (Moleküler Dinamik, Monte Carlo, enerji minimizasyonu)ni tanımlayabilecektir.
7	Karşılaştırmalı modelleme geliştirebilecek ve düzeltebilecektir.
8	İlaç tasarımı önerebilecektir.
9	Kemoinformatik yöntemleri ayırt edebilecektir.

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

AKTS İş Yükü

Etkinlik	Süre (Saat)	Sayı	İş Yükü
		Hesaplanan AKTS	0

Ölçme ve Değerlendirme

İçerik girilmemiştir.