

DERS TANITIM ve UYGULAMA BİLGİLERİ

Dersin Adı	Kodu	Yarıyıl	T+U+L (saat/hafta)	Türü (Z / S)	Yerel Kredi	AKTS
Bilgisayar Destekli ilaç Tasarımı	BIO 510	Bahar	03+00+00	Seçmeli	3	7.5
Akademik Birim:						
Öğrenim Türü:		Örgün eğitim				
Ön Koşullar		Yok				
Öğrenim Dili:		İngilizce				
Dersin Düzeyi:		Yüksek Lisans				
Dersin Koordinatörü:		Ebru Demet AKDOĞAN				
Dersin Amacı:		Protein-ligant docking, ilaç tasarımı docking uygulamaları, skorlama fonksiyonları, ensemble docking teknikleri, sanal tarama, QSAR (Yapı-Aktivite Sayısal İlişkisi) ve farmakofor modelleme konularında bilgilendirmek, ve en popüler iki docking programı AutoDock ve Gold ile en popüler farmakofor modelleme aracı LigandScout ile uygulamalı çalışmalar gerçekleştirmek				
Dersin İçeriği:		Protein-Ligant Docking'e genel bakış, ilaç tasarımı docking yöntemleri, moleküler docking için çözülmesi bekleyen sorunlar, skorlama fonksiyonları, yazılım programları: AutoDock and GOLD, ensemble docking, sanal tarama, LigandScout ile farmakofor modelleme.				
Dersin Öğrenme Çıktıları (ÖÇ):						
Dersin Öğrenme Yöntem ve Teknikleri		Proje/Talimat				

HAFTALIK PROGRAM

Hafta	Konular	Ön Hazırlık	ÖÇ
1			1
2			2
3			3
4			4
5			1,2,3,4
6			5
7			5
8			1,2,3,4,5
9			6
10			7
11			7
12			8
13			9
14			6,7,8,9

Kadir Has Üniversitesi'nde bir dönem 14 haftadır, 15. ve 16. hafta sınav haftalarıdır.

ZORUNLU ve ÖNERİLEN OKUMALAR

Molecular Modeling. Principles and Applications by A. Leach, 2nd edition, 2001 Pearson Educated Limited, Chap 12.
Molecular Design. Concepts and Applications by G. Schneider and K. H. Baringhaus, 2008 Wiley-VCH
Computational Structural Biology, by Schwede & Peitsch, 2008 World Scientific Publishing. Chapters 17 and 18.
Structure-Based Drug Discovery, by H. Jhoti and A.R. Leach, 2007 Springer, Chapters 8 and 9.
Quantitative Drug Design. A Critical Introduction by Y. C. Martin, 2010 CRC Press
Structure-Based Ligand Design, by K. Gubernator and H.J. Böhm, 1998 Wiley-VCH
Protein-Ligand Interactions. From Molecular Design to Drug Design. by HJ Böhm and G Schneider, 2003 Wiley-VCH
Virtual Screening in Drug Discovery, eds Alvarez and Shoichet, 2005 CRC Press
Virtual Screening: Principles, Challenges, and Practical Guidelines, Vol:48, Edts: Mannhold, Kubinyi and Folkers, 2011 Wiley-VCH

DİĞER KAYNAKLAR

AutoDock Tutorial
GOLD Tutorial
LigandScout Tutorial

DEĞERLENDİRME SİSTEMİ

Yarıyıl İçi Çalışmaları	Sayı	Katkı Payı (%)
Katılım	10	-
Proje	1	20
Sunum/Jüri	2	10
Dersle İlgili Sınıf Dışı Etkinlikler (okuma, bireysel çalışma vb.)	10	-
Ara Sınavlar/Sözlü Sınavlar/Kısa Sınavlar	1	20
Final Sınavı	1	50
Total:	25	100

İŞ YÜKÜ HESAPLAMASI

Etkinlikler	Sayısı	Süresi (saat)	Toplam İş Yüğü (saat)
Ders Saati	14	3	42
Proje	1	25	25
Sunum/Jüriye Hazırlık	2	17	34
Dersle İlgili Sınıf Dışı Etkinlikler	10	4	40
Ara Sınavlar/Sözlü Sınavlar/Kısa Sınavlar	1	15	15
Final Sınavı	1	19	19
Toplam İş Yüğü (saat):			175

1 AKTS = 25 saatlik iş yükü

PROGRAM YETERLİLİKLERİ (PY) ve ÖĞRENME ÇIKTILARI (ÖÇ) İLİŞKİSİ

#	PY1	PY2	PY3	PY4	PY5	PY6	PY7	PY8	PY9	PY10
---	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	------

Katkı Düzeyi: 1 Düşük, 2 Orta, 3 Yüksek