DERS TANITIM ve UYGULAMA BİLGİLERİ

Dersin Adı	Kodu	Yarıyıl	T+U+L (saat/hafta)	Türü (Z / S)	Yerel Kredi	AKTS
Farmakofor Modelleme	MBG 319	Güz-Bahar	03+00+00	Seçmeli	3	5

Akademik Birim:	Moleküler Biyoloji ve Genetik
Öğrenim Türü:	Örgün Eğitim
Ön Koşullar	Yok
Öğrenim Dili:	İngilizce
Dersin Düzeyi:	Lisans
Dersin Koordinatörü:	- -
Dersin Amacı:	İlaç keşfinde ve ADME-Tox farmakofor modellemenin ve farmakoforun önemini göstermek. Ligant temelli ve yapı temelli farmakofor modellerinin amacı ve uygylamalarını örneklerle açıklamak. Bu konuda kullanılan yazılım programlarını özellikle Discovery Studio bilgisayar programını öğretmek ve kendilerine verilen projelere uygulanmasını sağlamak.
Dersin İçeriği:	Protein ligant etkileşimi ve aralarındaki önemli kuvvetler İlaç Keşfi Farmakofor Modellemenin faydaları ve zorlukları Ligand temelli farmakofor modelleme Yapı temelli farmkofor modelleme Biovia Discovery Studio yazılım programının öğretilmesi Autodock programının kullanımını bilmek Sanal tarama ile ilaç geliştirme
Dersin Öğrenme Çıktıları (ÖÇ):	• **1-** Farmakoforun ne olduğunu bilmek • **2-** Farmakofor modellemenin anlamını kavramak. • **3-** İlaç geliştirmenin zorluklarının farkında olmak • **4-** Farmakofor tekniklerinin neler olduğunu bilmek • **5-** Ligand bazlı ve yapı bazlı farmakofor modelleme yapabilmek • **6-** BIOVIA DS kullanmayı biliyor olmak • **7-** Sanal tarama ile ilaç adayları bulabilir olmak
Dersin Öğrenme Yöntem ve Teknikleri	Bir ara sınav, bir final, proje ve ödevler

HAFTALIK PROGRAM

Hafta	Konular	Ön Hazırlık
1	Farmakofor Modellemeye Genel Bakış	Ders kitabından ilgili bölümün okunması
2	Bilgisayar Destekli İlaç Tasarımı Nedir?	Ders kitabından ilgili bölümün okunması
3	Ligand-Protein Etkileşimlerine Genel Bakış	Ders kitabından ilgili bölümün okunması
4	Sanal taramada farmakofor modelleme	Ders kitabından ilgili bölümün okunması
5	Yerleştirme simülasyonlarında farmakofor yöntemleri	Ders kitabından ilgili bölümün okunması
6	ADME-toksta farmakoforların uygulamaları	1. ila 5. haftalarda kapsanan bölümlerin incelenmesi
7	Farmakofor rehberliğinde ilaç hedef tanımlaması	Ders kitabından ilgili bölümün okunması
8	AutoDock yazılım aracına giriş	AutoDock ile ilgili programları kişisel bilgisayarınıza yükleme
9	BIVIA DS'ye Giriş	Pratik
10	Sanal Tarama	Pratik
11	Ara Sınav Projesi	Pratik

12	Farmakofor modellemede gelecek perspektifleri	Ders kitabından ilgili bölümün okunması
13	Parça bazlı ilaç tasarımı	Ders kitabından ilgili bölümün okunması
14	Bitirme projesi	9 ila 12. haftalarda kapsanan bölümlerin incelenmesi

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

ZORUNLU ve ÖNERİLEN OKUMALAR

Pharmacophore modeling: advances, limitations, and current utility in drug discovery; Xiaoyu Qing, Xiao Yin Lee, Joren De Raeymaeker, Jeremy RH Tame, Kam YJ Zhang, Marc De Maeyer, Arnout RD Voet
Pharmacophore Approaches In Drug Discovery; Thierry Langer
ThreeDimensional Pharmacophore Modelling of Monoamine oxidase-A (MAO-A) inhibitors; Kalapatapu V.V.M. Sairam, Roop K. Khar, Rama Mukherjee and Swatantra K. Jain
Synthesis, Structure–Activity Relationship, and Pharmacophore Modeling Studies of Pyrazole-3-Carbohydrazone Derivatives as Dipeptidyl Peptidase IV Inhibitors; Deyan Wu, Fangfang Jin, Weiqiang Lu 1, Jin Zhu, Cui Li, Wei Wang, Yun Tang, Hualiang Jiang, Jin Huang, Guixia Liu and Jian Li

DİĞER KAYNAKLAR

AutoDock Tutorial
BIOVIA DS Tutorial

DEĞERLENDİRME SİSTEMİ

Yarıyıl İçi Çalışmaları	**Sayı**	**Katkı Payı (%)**
Katılım	14	10
Ödev	2	10
Dersle İlgili Sınıf Dışı Etkinlikler (okuma, bireysel çalışma vb.)	5	20
Ara Sınavlar/Sözlü Sınavlar/Kısa Sınavlar	1	30
Final Sınavı	1	30
Total:	**23**	**100**

İŞ YÜKÜ HESAPLAMASI

Etkinlikler	**Sayısı**	**Süresi (saat)**	**Toplam İş Yükü (saat)**
Ders Saati	14	3	42
Ödev	5	6	30
Dersle İlgili Sınıf Dışı Etkinlikler	5	5	25
Ara Sınavlar/Sözlü Sınavlar/Kısa Sınavlar	1	10	10
Final Sınavı	1	18	18

Toplam İş Yükü (saat):	**125**

1 AKTS = 25 saatlik iş yükü

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

#	PY1	PY2	PY3	PY4	PY5	PY6	PY7	PY8	PY9	PY10	PY11	PY12
OC1												
OC2												
OC3												
OC4												
OC5												
OC6												
OC7												

Katkı Düzeyi: 1 Düşük, 2 Orta, 3 Yüksek