

# DERS TANITIM ve UYGULAMA BİLGİLERİ

Dersin Adı	Kodu	Yarıyıl	T+U+L (saat/hafta)	Türü (Z / S)	Yerel Kredi	AKTS
Bilgisayar Destekli İlaç Tasarımı	MBG 432	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:	Protein-ligant doking, ilaç tasarımında docking uygulamaları, skortlama 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 tasarımında docking yöntemleri, moleküler docking için çözülmeyi bekleyen sorunlar, skortlama fonksiyonları, yazılım programları: AutoDock and GOLD, ensemble docking, sanal tarama, LigandScout ile farmakofor modelleme.					
Dersin Öğrenme Çıktıları (ÖÇ):	<ul style="list-style-type: none"><li>• 1- Protein-ligant docking algoritmaları hakkında fikir sahibi olmak</li><li>• 2- İlaç geliştirme için doking uygulamaları yapabilmek</li><li>• 3- Moleküler docking için çözülmeyi bekleyen sorunları bilme ve tartışabilme becerisi</li><li>• 4- Skortlama tekniğini kavramak</li><li>• 5- AutoDock, GOLD ve GLIDE gibi doking yazılımlarını kullanabilmek</li><li>• 6- Ensemble docking için farklı algoritmaları tanımlayabilme</li><li>• 7- Bir sanal tarama deneyi kurgulayabilme</li><li>• 8- QSAR hakkında fikir sahibi olma</li><li>• 9- LigandScout programı ile farmakofor taraması ve modellemesi yapabilmek</li></ul>					
Dersin Öğrenme Yöntem ve Teknikleri	Bir ara sınav, bir final, projeler ve sunumlar					

## HAFTALIK PROGRAM

Hafta	Konular	Ön Hazırlık
1	Protein-Ligant Docking'e genel bakış	Ders kitabından ilgili konuyu okuma
2	İlaç tasarımında docking: Algoritmalar, Bölüm I	Ders kitabından ilgili konuyu okuma
3	Moleküler docking için çözülmeyi bekleyen sorunlar	Ders kitabından ilgili konuyu okuma
4	Skortlama Fonksiyonları	Ders kitabından ilgili konuyu okuma
5	Sunum #1	İlgili projenin sunumu
6	AutoDock and GOLD yazılım programlarına giriş	AutoDock ve ilgili programların kişisel bilgisayara yüklenmesi
7	AutoDock ve GOLD kullanan örnek çalışmalar	AutoDock ve ilgili programların kullanım klavuzları
8	Ara Sınav	Ders kitabından 1-5 haftalar arası işlenen konuları çalışma
9	Ensemble Docking	Ders kitabından ilgili konuyu okuma
10	Sanal Tarama	Ders kitabından ilgili konuyu okuma
11	Sanal Tarama	Ders kitabından ilgili konuyu okuma

12	QSAR çalışmaları	Ders kitabından ilgili konuyu okuma
13	LigandScout kullanan örnek çalışmalar	Ders kitabından ilgili konuyu okuma
14	Sunum #2	İlgili projenin sunumu

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

## ZORUNLU ve ÖNERİLEN OKUMALAR

Protein-Ligand Interactions. From Molecular Design to Drug Design. by H.J. Böhm and G. Schneider, 2003 Wiley-VCH  
Molecular Design. Concepts and Applications by G. Schneider and K. H. Baringhaus, 2008 Wiley-VCH

## DİĞER KAYNAKLAR

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  
Virtual Screening in Drug Discovery, eds Alvarez and Shoichet, 2005 CRC Press  
Molecular Modeling. Principles and Applications by A. Leach, 2nd edition, 2001 Pearson Educated Limited

## DEĞERLENDİRME SİSTEMİ

Yarıyıl İçi Çalışmaları	Sayı	Katkı Payı (%)
Katılım	14	2
Proje	1	10
Ödev	8	18
Sunum/Jüri	1	5
Ara Sınavlar/Sözlü Sınavlar/Kısa Sınavlar	2	25
Final Sınavı	1	40
<b>Total:</b>	<b>27</b>	<b>100</b>

## İŞ YÜKÜ HESAPLAMASI

Etkinlikler	Sayısı	Süresi (saat)	Toplam İş Yüğü (saat)
Ders Saati	14	3	42
Proje	1	15	15
Ödev	8	2	16
Sunum/Jüriye Hazırlık	1	7	7
Ara Sınavlar/Sözlü Sınavlar/Kısa Sınavlar	2	15	30
Final Sınavı	1	15	15
<b>Toplam İş Yüğü (saat):</b>			<b>125</b>

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												
OC8												
OC9												

**Katkı Düzeyi:** 1 Düşük, 2 Orta, 3 Yüksek