

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, skrolama 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, skrolama fonksiyonları, yazılım programları: AutoDock and GOLD, ensemble docking, sanal tarama, LigandScout ile farmakofor modelleme. | | | | | |
| Dersin Öğrenme Çıktıları (ÖÇ): | <ul style="list-style-type: none">1- Protein-ligant docking algoritmaları hakkında fikir sahibi olmak2- İlaç geliştirme için doking uygulamaları yapabilmek3- Moleküler docking için çözülmeyi bekleyen sorunları bilme ve tartışabilme becerisi4- Skrolama tekniğini kavramak5- AutoDock, GOLD ve GLIDE gibi doking yazılımlarını kullanabilmek6- Ensemble docking için farklı algoritmaları tanımlayabilme7- Bir sanal tarama deneyi kurgulayabilme8- QSAR hakkında fikir sahibi olma9- LigandScout programı ile farmakofor taraması ve modellemesi yapabilmek | | | | | |
| 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 | Skrolama 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 |
| Total: | 27 | 100 |

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 |
| Toplam İş Yüğü (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 |
|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| OC1 | 3 | 3 | 3 | 3 | | | | | |
| OC2 | 3 | 3 | 3 | 3 | | | | | |
| OC3 | 3 | 3 | 3 | 3 | | | | | |
| OC4 | 3 | 3 | 3 | 3 | | | | | |
| OC5 | 3 | 3 | 3 | 3 | | | | | |
| OC6 | 3 | 3 | 3 | 3 | | | | | |
| OC7 | 3 | 3 | 3 | 3 | | | | | |
| OC8 | 3 | 3 | 3 | 3 | | | | | |
| OC9 | 3 | 3 | 3 | 3 | | | | | |

Katkı Düzeyi: 1 Düşük, 2 Orta, 3 Yüksek