



دانشکده داروسازی

گروه آموزشی: شیمی دارویی

طرح درس دوره Course Plan

مشخصات فراگیران				مشخصات درس				
دانشکده: داروسازی				عنوان واحد درسی: شیمی محاسباتی و طراحی دارو				
رشته تحصیلی: شیمی دارویی				نوع واحد درسی: نظری				
مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد				کارآموزی: ۰	کارآموزی: ۰	عملی: ۰	نظری: ۳	تعداد واحد
سایر	کارورز	کارآموز	ترم تحصیلی	کارورزی: ۰	کارآموزی: ۰	عملی: ۰	نظری: ۵۴	تعداد ساعت
			اول ۱۴۰۴- ۱۴۰۵	پیشنیاز: شیمی دارویی ۱				کد درس: ۰۹
سایر:				سایر:				
مشخصات مسؤل درس								
رشته تحصیلی: شیمی دارویی				نام و نام خانوادگی: حافظه صالح آبادی				
رتبه علمی: استادیار				مقطع تحصیلی: PhD				
پست الکترونیک: hsalehabadi@zums.ac.ir				شماره تماس: ۰۹۱۵۳۵۱۹۷۴۸				
محل کار: دانشگاه علوم پزشکی زنجان، دانشکده داروسازی، گروه شیمی دارویی								
نام و نام خانوادگی مدرس(مدرسان): حافظه صالح آبادی								
بازنگری بر اساس نیاز جامعه:			تاریخ تدوین طرح درس:			نحوه برگزاری دوره:		
شماره جلسات بازنگری شده:		تاریخ				ترکیبی	مجازی	حضور
۲ جلسه		۱۴۰۴/۵/۲۶	۱۴۰۲/۱۱/۱۶					×

اهداف آموزشی

هدف کلی:

- ❖ اهداف اختصاصی (رفتاری): در پایان برنامه آموزشی، انتظار می رود فراگیر(ان) قادر باشند:
- ❖ حیطه شناختی: کار با نرم افزارهای مورد استفاده در شیمی محاسباتی و استفاده از این نرم افزارها در طراحی دارو و شناسایی ترکیبات پیشرو را بخوبی فراگیرند.
- ❖ حیطه عاطفی: اهمیت و نقش شیمی محاسباتی را در کاهش هزینه و زمان و افزایش دقت و کارایی پروژه های طراحی دارو درک کنند.
-
- ❖ حیطه روانی حرکتی: انگیزه برای تحقیق در این زمینه را بنوبه خود در آینده پیدا کنند.
-

روش های تدریس:

- | | | | |
|------------------------------------|--|---|---|
| <input type="checkbox"/> سخنرانی | <input type="checkbox"/> پرسش و پاسخ | <input checked="" type="checkbox"/> بحث گروهی | <input type="checkbox"/> ایفای نقش * x |
| <input type="checkbox"/> نمایش عمل | <input type="checkbox"/> کارگاه آموزشی | <input type="checkbox"/> بیمار شبیه سازی ش | <input type="checkbox"/> Bedside teaching |
| سایر (بنویسید): | | | |

مواد و وسایل آموزشی:

وسایل کمک آموزشی از جمله پروژکتور و لپ تاپ استفاده می شوند.

تجارب یادگیری (حین تدریس):

نحوه استفاده از نرم افزارهای مورد استفاده در شیمی محاسباتی و کاربرد این نرم افزارها را در بررسی ارتباط بین ساختار و اثر دارو و نیز طراحی ترکیبات پیشرو جدید با استفاده از داکینگ مولکولی را می آموزند. همینطور نحوه سخنرانی و تفهیم مفاهیم درسی به دانشجویان و تسلط بر سوالات در نحوه پاسخ گویی به دانشجویان در سر کلاس را می آموزند.

تکالیف یادگیری (بعد تدریس)

مرور دروس ارایه شده جهت پاسخ در جلسه آتی و نیز انجام کار محول شده در خانه

ضوابط آموزشی و سیاست های مدرس

انتظارات: از دانشجو انتظار می رود ضمن حفظ احترام به ارزشهای آموزشی درس و همکاری با مدرس در زمینه یادگیری از طریق انجام وظایف محوله به او، ارزشهای معنوی همچون حفظ شخصیت خود و مدرسش را همواره مد نظر داشته و به اندازه تلاش و کوشش و همکاری خود در زمینه های مذکور انتظار دریافت نتیجه مورد قبول خود را در پایان ترم داشته باشد.

همچنین تسلط بر کلاس درس را، به عنوان سخنران آتی این درس، به حد مورد قبول بدست آورد.

مجازها:

محدودیتها:

توصیه های ایمنی (دروس عملی / آزمایشگاهی / بالینی / اعرصه):

فهرست منابع درسی:

- Molecular Modeling for beginners, Hinchliff, A.
- Computational Drug Design: A Guide for Computational and Medicinal Chemists, Young, D.C.

روش ارزیابی:

آزمون کتبی ×				مصاحبه (شفاهی)	مشاهده عملکرد (چک لیست)
عینی ×		تشریحی ×			
صحيح / غلط	جور کردنی	چند گزینه ای ×	کوتاه پاسخ ×	گسترده پاسخ	

بارم بندی نمره (از ۲۰ نمره):

(نمره قبولی از ۲۰، برابر می باشد).

حضور و غیاب کلاسی: ×	مشارکت کلاسی: با توجه به نظر استاد نمره مثبت خواهد داشت.	انجام تکالیف عملی و پروژه: ۱۴ نمره
کوئیز: ×	امتحان میان ترم: ندارد	امتحان پایان ترم: ۶ نمره
سایر موارد:		

جدول زمانی ارائه برنامه:

شماره جلسه	روش ارائه	تاریخ ارائه	ساعت ارائه	عنوان جلسه	مدرس (مدرسین)
۱	حضور	۱۴۰۴/۷/۶	۱۰-۱۳	آشنایی با مبانی شیمی محاسباتی و نصب نرم افزار	دکتر صالح آبادی
۲	حضور	۱۴۰۴/۷/۱۳	"	آشنایی با روشهای مختلف طراحی دارو شامل روش های De Novo, Homology Modeling, Virtual Screening	"
۳	حضور	۱۴۰۴/۷/۲۰	"	آشنایی و کار با نرم افزارهای Chemaxon و Chemoffice	"
۴	حضور	۱۴۰۴/۷/۲۷	"	آشنایی با مبانی داکینگ مولکولی و نرم افزارهای مربوطه	"
۵	حضور	۱۴۰۴/۸/۴	"	آشنایی و کار با نرم افزار MGL TOOLS	"
۶	حضور	۱۴۰۴/۸/۱۱	"	آشنایی با چگونگی انتخاب ساختارهای کریستالوگرافی و سرچ در سایت PDB	"
۷	حضور	۱۴۰۴/۸/۱۸	"	تهیه ورودی مناسب برای داکینگ مولکولی با استفاده از نرم افزارهای Viewer Lite, Autogrid, MGL TOOLS	"
۸	مجازی	۱۴۰۴/۸/۲۵	"	انجام داکینگ مولکولی بصورت عملی و تمرین نرم افزارهای مربوطه	"
۹	حضور	۱۴۰۴/۹/۲	"	آشنایی با نرم افزار Ligand Scot و چگونگی ساخت مدل فارماکوفوری	"
۱۰	حضور	۱۴۰۴/۹/۹	"	آشنایی با پایگاههای داده ZINC, NCI و انجام غربالگری مجازی روی این پایگاهها	"
۱۱	حضور	۱۴۰۴/۹/۱۶	"	انجام عملی غربالگری مجازی و تمرین روش ها	"

"	آشنایی و کار با نرم افزارهای مرتبط با آنالیز نتایج حاصل از Ligplus, Discovery studio	"	۱۴۰۴/۹/۲۳	حضور	۱۲
"	آشنایی و کار با نرم افزارهای Pymol, VMD	"	۱۴۰۴/۹/۳۰	حضور	۱۳
"	آشنایی با مبانی QSAR, QSPR و انواع توصیف گرها	"	۱۴۰۴/۱۰/۷	حضور	۱۴
"	آشنایی با نرم افزارهای Gaussian, Hyperchem	"	۱۴۰۴/۱۰/۱۴	حضور	۱۵
"	آشنایی با نرم افزارهای SYBYL, Dragon	"	۱۴۰۴/۱۰/۲۱	حضور	۱۶
"	آشنایی با نرم افزار SPSS و استفاده از این نرم افزار جهت استخراج معادلات QSAR	"	۱۴۰۴/۱۰/۲۸	حضور	۱۷
تاریخ امتحان پایان ترم: تیر ماه ۱۴۰۳					۱۸