

بسمه تعالی

فرم معرفی دروس دانشگاه علوم پزشکی اصفهان
دانشکده داروسازی و علوم دارویی گروه آموزشی شیمی دارویی
(نیمسال: دوم ۹۵-۹۴)

معرفی درس:

* نام و شماره درس : شیمی محاسباتی و طراحی دارو

* رشته و مقطع تحصیلی : PhD شیمی دارویی

* روز و ساعت برگزاری: ساعت ۸-۱۰ دو شنبه / ساعت ۱۶-۱۴ یکشنبه

* محل برگزاری : شورای گروه شیمی دارویی

* تعداد و نوع واحد (نظری / عملی) : ۲ واحد نظری

* نام مسئول درس: دکتر محمود میرزائی

* نام ارائه دهندگان درس: دکتر محمود میرزائی - دکتر افشین فصیحی

* تلفن و روزهای تماس :: دکتر محمود میرزائی: ۷۱۰۱، دکتر افشین فصیحی: ۷۱۰۰ / شنبه تا چهارشنبه

* آدرس دفتر : گروه شیمی دارویی - دانشکده داروسازی و علوم دارویی

fassihi@pharm.mui.ac.ir

mdmirzaei@pharm.mui.ac.ir

* آدرس پست الکترونیک:

* هدف کلی درس :

کسب دانش نظری و مهارت عملی در به کارگیری نرم افزارهای مورد استفاده در شیمی دارویی

* منابع اصلی درس:

کتب:

1. Hinchcliff A. Molecular modeling for beginners.
2. Young P.C. Computational Drug Design: A guide for computational and medicinal chemist.
3. Bultink P. Computational Medicinal Chemistry for Drug Discovery.

نرم افزارها زیر و راهنماهای یادگیری (Manuals and Tutorials) مربوطه:

Chemoffice 2008, Hyperchem, Discovery Studio Visualizer, Ds Viewer, VMD, Gaussian 2009, Gausview, Autodock 4.2, JMol, PyMole, Gromacs.

* نحوه ارزشیابی دانشجویان و بارم مربوط به هر ارزشیابی :

دکتر میرزائی: الف (سمینار (۵ نمره) / ب) امتحان پایان دوره: (۱۵ نمره)

دکتر فصیحی: الف) تکالیف (۱۰ نمره) / ب) امتحان پایان دوره: (۱۰ نمره)

* تاریخ امتحان پایان ترم : با توافق دانشجویان تعیین می شود.

*جدول زمان بندی ارایه برنامه درس: در نیمسال دوم ۹۵-۹۴

جلسه	تاریخ	ساعت	عنوان	مدرس
اول	یکشنبه ۹۴/۱۱/۱۱	۱۴-۱۶	آشنائی با مبانی QSAR و QSAR دویعدی	دکتر فصیحی
دوم	یکشنبه ۹۴/۱۱/۱۸	۱۴-۱۶	آشنائی با انواع توصیف گرهای صفر، یک، دو و سه بعدی	دکتر فصیحی
سوم	یکشنبه ۹۴/۱۱/۲۵	۱۴-۱۶	آشنائی با انواع توصیف گرهای صفر، یک، دو و سه بعدی	دکتر فصیحی
چهارم	یکشنبه ۹۴/۱۲/۲	۱۴-۱۶	آشنائی با کاربردهای نرم افزار های توصیف گرهای محاسبه کننده توصیف گرها: Dragon	دکتر فصیحی
پنجم	یکشنبه ۹۴/۱۲/۹	۱۴-۱۶	آشنائی با کاربردهای نرم افزار های توصیف گرهای محاسبه کننده توصیف گرها: Hyperchem, ChemOffice	دکتر فصیحی
ششم	یکشنبه ۹۵/۱/۱۵	۱۴-۱۶	آشنائی با کاربردهای نرم افزار های آماری: SPSS, EXCEL	دکتر فصیحی
هفتم	یکشنبه ۹۵/۱/۲۲	۱۴-۱۶	آشنائی با کاربردهای نرم افزار های آماری: SPSS, EXCEL	دکتر فصیحی
هشتم	یکشنبه ۹۵/۱/۲۹	۱۴-۱۶	ساخت و تفسیر مدل های MLR, PCR	دکتر فصیحی
نهم	یکشنبه ۹۵/۲/۵	۱۴-۱۶	ساخت و تفسیر مدل های MLR, PCR	دکتر فصیحی
دهم	دوشنبه ۹۴/۱۱/۱۲	۸-۱۰	مروری بر شیمی دارویی محاسباتی	دکتر میرزائی
یازدهم	دوشنبه ۹۴/۱۱/۱۹	۸-۱۰	مکانیک مولکولی در طراحی ساختارها	دکتر میرزائی
دوازدهم	دوشنبه ۹۴/۱۲/۱۷	۸-۱۰	روش های نیمه تجربی در طراحی ساختارها	دکتر میرزائی
سیزدهم	دوشنبه ۹۴/۱/۲۳	۸-۱۰	شیمی کوانتومی و توابع موجی	دکتر میرزائی
چهاردهم	دوشنبه ۹۵/۱/۳۰	۸-۱۰	نظریه تابعی چگالی در طراحی ساختارها	دکتر میرزائی
پانزدهم	دوشنبه ۹۵/۲/۶	۸-۱۰	روش های هیبریدی در طراحی ساختارها	دکتر میرزائی
شانزدهم	دوشنبه ۹۵/۲/۱۳	۸-۱۰	ساختارهای سه بعدی	دکتر میرزائی
هفدهم	دوشنبه ۹۵/۲/۲۰	۸-۱۰	پتانسیل الکترواستاتیکی و برهم کنش ها	دکتر میرزائی
هیجدهم	دوشنبه ۹۵/۳/۱۰	۸-۱۰	ارایه سمینار	دکتر میرزائی