

DERS BİLGİLERİ FORMU	
Dersi Açan Fakülte/ Enstitü	Mühendislik Fakültesi
Dersi Açan Bölüm/ Ana Bilim Dalı	Biyomedikal Mühendisliği Bölümü
Dersin Kodu	BMM 424
Dersin Adı	Bilgisayar Destekli İlaç Tasarımı
Öğretim Dili	İngilizce
Dersi Alan Programlar	Biyomedikal Mühendisliği Bölümü
Ders Türü	Seçmeli
Dersin Seviyesi	Lisans
AKTS Kredisi	6
Ön Koşullar	BMM 310
Dersin İçeriği	Bu ders, algoritmik geliştirme ve ilaç tasarımlarında karşılaşılan problemlere çözüm bulmak amacıyla, bilgisayar destekli ilaç tasarımı temel kavramları, modelleme tekniklerini ve hesaplama algoritmalarını tanıtmaktadır. Moleküler modelleme, sistem simülasyonu, optimizasyonu ve öğrenimini içeren algoritmalar üzerine yoğunlaşan bu ders, hesaplamalı uygulama alanında geçmişi olmayan öğrencilere temel bilgiler vermeyi ve bu alana özgün katkılar sağlamaları için öğrencilerin öğrenme ve uygulama yetilerini efektif bir şekilde kullanmayı öğretmeyi amaçlar.
Dersin Amacı	Dersi tamamlayan öğrencilerin, 1. Yapısal biyoenformatik, ilaç tasarımı ve çeşitli sağlık alanlarında algoritmalar geliştirmeleri ve uygulamaları 2. Bilgisayar destekli ilaç tasarımının ortaya çıkmakta olan uygulamalarına mühendislik ilkelerini ve algoritmik düşüncüyü uygulamaları 3. Biyomoleküllerin ve biyomoleküler sistemlerin analizi ve tasarımı için hesaplama vakasuları konusunda pratik beceriler geliştirebilmeleri beklenmektedir.
Dersin Kazanımları	Bu ders, öğrencilerin teorik bilgileri deneysel alanlarla bütünleştirebilmelerini, sorunlara özgün ve yaratıcı tepkiler geliştirebilmelerini, eleştirel analiz ve değerlendirme yaparak uygulama yapabilmelerini sağlayacaktır.
Ders Kitabı ve/veya Kaynaklar	<ul style="list-style-type: none"> • Computer-Aided Drug Design: Methods and Applications, Thomas J. Perun, 1990 • Computer-Aided Drug Design and Delivery Systems, Ahindra Nag, 2010 • Güncel makaleler
Değerlendirme Ölçütleri	Katkı payı
Devam	
Laboratuvar	
Uygulama	
Alan Çalışması	
Ödev	
Sunum	
Projeler	20
Seminer	
Ara Sınavlar	30
Quiz	10
Final	40
Toplam	100
Ders Planı	Tartışılacak/ İşlenecek Konular
1. Hafta	Bilgisayar Destekli İlaç Tasarımı ve Yazılımlarına Giriş
2. Hafta	Moleküler Mekanik, yarı ampirik ve ab initio hesaplamaları
3. Hafta	Hedefler ve hedef sınıflar I: Moleküler bağlanma ve skorlama
4. Hafta	Hedefler ve hedef sınıflar II: Farmakoforlar ve Görsel Tarama
5. Hafta	QSAR (Nicel Yapı Aktivite İlişkisi) yöntemleri

6. Hafta	Kombinatoryal ve Paralel Kütüphane Tasarımı
7. Hafta	Moleküler Dinamik Simülasyonları: Örnekleme
8. Hafta	Dizi, yapı ve veriden protein fonksiyon tahmini: Makine öğrenmesi
9. Hafta	Bilgisayar destekli protein ve ilaç tasarımı: Kombinatoryal optimizasyon
10. Hafta	Bilgisayar destekli protein ve ilaç tasarımı: Kombinatoryal optimizasyon
11. Hafta	Biyomoleküler sistem modellemesi: Kararlı Durumlar ve Dinamikler
12. Hafta	Proje Sunumları