

سر فصل های ارائه شده برای درس طراحی دارو محاسباتی (یک واحد نظری) بصورت زیر می باشد :

مسئول دوره : خانم دکتر پیرهادی

۱. مقدمه ای بر روش های طراحی دارو محاسباتی
۲. روش های غربالگری مجازی با استفاده از جستجوی مشابهت
۳. مطالعه موردی غربالگری مجازی با استفاده از جستجوی مشابهت
۴. کاربرد مدل سازی فارماکوفور در طراحی دارو
۵. روش های غربالگری مجازی با استفاده از مدل سازی فارماکوفور ساختار محور
۶. روش های غربالگری مجازی با استفاده از مدل سازی فارماکوفور بر اساس لیگاند
۷. مقدمه ای بر روش داکینگ مولکولی
۸. روش های غربالگری مجازی بر اساس ساختار هدف دارویی
۹. پیش بینی محاسباتی هدف دارویی ۱
۱۰. پیش بینی محاسباتی هدف دارویی ۲
۱۱. روش های طراحی دارو بر اساس قطعات مولکولی
۱۲. مقدمه ای بر روش های دینامیک مولکولی
۱۳. روش های ارتباط ساختار-فعالیت کمی (کیوسار)
۱۴. اهمیت روش های کیوسار در طراحی دارو
۱۵. روش های فاکتوری در آنالیز داده های کمی
۱۶. مثال های موفقیت آمیز روش های محاسباتی در طراحی دارو