

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

مسئول دوره: آقای دکتر پوست فروش

۱. مقدمه ای بر روش های محاسباتی ارزیابی دارو
۲. مقدمه ای بر روش داکینگ مولکولی
۳. غربالگری مجازی بر اساس ساختار ۳ بعدی اهداف دارویی
۴. پیش بینی محاسباتی اهداف دارویی ۱
۵. پیش بینی محاسباتی اهداف دارویی ۲
۶. مقدمه ای بر فارماکولوژی مبنی بر شبکه
۷. روش های طراحی دارو بر اساس قطعات مولکولی
۸. روش های ارتباط ساختار-فعالیت کمی (کیوسار)
۹. استفاده از روش های کیوسار در طراحی و ارزیابی داروها
۱۰. آشنایی با پایگاه های داده در حوزه طراحی دارو
۱۱. مقدمه ای بر روش های دینامیک مولکولی
۱۲. مقدمه ای بر روش های محاسباتی ارزیابی رفتار دارو در محیط بدن
۱۳. مقدمه ای بر آنالیز داده
۱۴. مقدمه ای بر استفاده از هوش مصنوعی در طراحی دارو