



به نام ایزد دانا

تاریخ به روز رسانی: ۱۳۹۸/۰۳/۱۳

(کاربرگ طرح درس)

نیمسال اول/دوم سال تحصیلی

دانشکده علوم

نام درس	فارسی: کامپیوتر در شیمی	تعداد واحد: نظری ۳ عملی...	مقطع: کارشناسی □ کارشناسی ارشد □ دکتری ■
	لاتین: Computer in Chemistry	پیش نیازها و هم نیازها:	
مدرس/مدرسین: مهدی صادقی	شماره تلفن اتاق: ۰۲۳۳۱۵۳۲۲۲۳		
پست الکترونیکی: mehdisadeghi@semnan.ac.ir	منزلگاه اینترنتی:		
برنامه تدریس در هفته و شماره کلاس:			
اهداف درس: آشنایی دانشجویان دکتری شیمی با مفاهیم شبیه سازی های کامپیوتری داکینگ و دینامیک مولکولی			
امکانات آموزشی مورد نیاز: پروژکتور و دسترسی به اینترنت			
نحوه ارزشیابی	فعالیت های کلاسی و آموزشی	ارزشیابی مستمر (کوئیز)	امتحان میان ترم
درصد نمره	۲	۱۰	۳
منابع و مآخذ درس	Computer aided drug design by Dev Bukhsh Singh		
امتحان پایان ترم	۵		

بودجه بندی درس

شماره هفته آموزشی	مبحث	توضیحات
۱	مقدمه و معرفی مبانی شبیه سازی های بیومولکولها	
۲	ساختار بیومولکولها	
۳	ساختار پروتئینها	
۴	پایگاه داده PDB	
۵	فرمتهای ساختاری و توالی بیومولکولها	
۶	نمایش ساختار بیومولکولها با SPDBV	
۷	مبانی طراحی دارو	
۸	مبانی داکینگ مولکولی	
۹	ابزارهای داکینگ مولکولی (Autodock Vina)	
۱۰	نرم افزارهای PMV و ADT (نصب و راه اندازی)	
۱۱	آماده سازی فایل های ورودی	
۱۲	اجرای داکینگ مولکولی و پردازش خروجی ها	
۱۳	مبانی دینامیک مولکولی	
۱۴	ابزارهای دینامیک مولکولی (Amber, Gromacs)	
۱۵	آماده سازی فایل های ورودی، تعریف باکس شبیه سازی، افزودن آب و یونها و کمینه سازی انرژی	
۱۶	مرحله Production و تحلیل خروجی های MD	