

بنام خدا
دانشگاه علوم پزشکی کرمانشاه
دانشکده داروسازی
قالب نگارش طرح درس

عنوان درس : مدل سازی در مقیاس نانو

مخاطبان: دانشجویان کارشناسی ارشد نانوفناوری پزشکی

تعداد و نوع واحد: ۲ واحد (۱ واحد نظری - ۱ واحد عملی) درس پیش نیاز: ندارد

زمان ارائه درس: نیمسال دوم ۱۴۰۱-۱۴۰۲ ساعت: دوشنبه ۸-۱۰

مدرس : دکتر سجاد مرادی

هدف کلی درس:

آشنائی دانشجویان با انواع روشهای محاسباتی مورد استفاده در تحلیل نانوساختارها.

اهداف کلی جلسات : (جهت هر جلسه یک هدف)

۱. تاریخچه و مقدمه محاسبات مولکولی
۲. انواع روشهای محاسباتی، مزایا، معایب و کاربردها
۳. آماده سازی فایل های مختصاتی برای شروع یک کار مدل سازی
۴. داکینگ مولکولی: آماده سازی مولکولها برای انجام داکینگ
۵. داکینگ و آنالیز نتایج
۶. آشنایی با محیط لینوکس و نرم افزار گرومکس
۷. شروع کار با نرم افزار گرومکس و تهیه باکس حاوی مولکول حلال دهی شده
۸. خنثی سازی سیستم و ایجاد تعادل دمایی و فشاری
۹. انجام شبیه سازی و آنالیز نتایج
۱۰. روشهای تهیه فایل توپولوژی برای مولکولهای غیر پروتئینی
۱۱. تهیه سیستمهای پلیمر-دارویی
۱۲. شبیه سازی نانوذرات دارویی
۱۳. آنالیز نانوحاملهای شبیه سازی شده
۱۴. آشنایی با روشهای شبیه سازی غشاهای زیستی
۱۵. آشنایی با روشهای شبیه سازی اعمال نیرو

اهداف ویژه رفتاری به تفکیک اهداف کلی هر جلسه

جلسه اول

هدف کلی: آشنایی با تاریخچه و مقدمه محاسبات مولکولی

اهداف ویژه:

در پایان مباحث مطرح شده، دانشجو قادر باشد:

۱-۱- پیشینه ای از روشهای محاسباتی را شرح دهد.

۱-۲- مقدمات محاسبات را توضیح دهد.

جلسه دوم

هدف کلی: انواع روشهای محاسباتی، مزایا، معایب و کاربردها

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد:

۲-۱- روشهای کوانتومی را به همراه مزایا و معایب و کارایی آنها توضیح دهد.

۲-۲- روشهای نیمه تجربی را به همراه مزایا و معایب و کارایی آنها توضیح دهد

۲-۳- روشهای کلاسیکی را به همراه مزایا و معایب و کارایی آنها توضیح دهد

۲-۴- روشهای ترکیبی را به همراه مزایا و معایب و کارایی آنها توضیح دهد

جلسه سوم

هدف کلی: آماده سازی فایل‌های مختصاتی برای شروع یک کار مدلسازی

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد

۳-۱- اشکال مولکولی را ترسیم و بهینه سازی ساختاری آنها را انجام دهد.

۳-۲- فایل‌های ساختاری ماکرومولکول‌های زیستی را از پایگاه‌های مربوطه تهیه و آماده کند.

جلسه چهارم

هدف کلی: داکینگ مولکولی: آماده سازی مولکولها برای انجام داکینگ

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد

۳-۱- اطلاعات مورد نیاز برای داکینگ مولکولی را به فایل‌های مختصاتی اولیه اضافه کند.

۳-۲- پارامترهای داکینگ را برای سیستم مورد محاسبه تعریف کند.

جلسه پنجم

هدف کلی: داکینگ و آنالیز نتایج

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد

۳-۱- نرم افزارهای داکینگ اتوداک و وینا را ران کند.

۳-۲- نتایج را با استفاده از نرم افزارهای مربوطه استخراج و تحلیل کند.

جلسه ششم

هدف کلی: آشنایی با محیط لینوکس و نرم افزار گرومکس

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد

۳-۱- سیستم عامل لینوکس را بشناسد و در حد ابتدایی از آن استفاده کند.

۳-۲- نرم افزار گرومکس و قسمت‌های مختلف میدان نیرو را بشناسد.

جلسه هفتم

هدف کلی: شروع کار با نرم افزار گرومکس و تهیه باکس حاوی مولکول حلال دهی شده

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد

۳-۱- فایل مختصاتی سیستم مورد نظر را برای شبیه سازی آماده کند

۳-۲- قسمت‌های مختلف یک فایل توپولوژی را بشناسد.

۳-۳- به جعبه شبیه سازی مولکولهای حلال اضافه کند.

جلسه هشتم

هدف کلی: خنثی سازی سیستم و ایجاد تعادل دمایی و فشاری

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد

۳-۱- بار سیستم را محاسبه و از نظر الکتریکی خنثی کند.

۳-۲- پارامترهای مورد نیاز برای تنظیم دما و فشار در مقادیر مورد نظر تنظیم کند.

جلسه نهم

هدف کلی: انجام شبیه سازی و آنالیز نتایج

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد

۳-۱- شبیه سازی را انجام و از اتمام آن اطمینان حاصل کند.

۳-۲- نتایج شبیه سازی را از فایل خروجی استخراج و آنها را تحلیل کند.

جلسه دهم

هدف کلی: روشهای تهیه فایل توپولوژی برای مولکولهای غیر پروتئینی

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد

- ۳-۱- تفاوت بین میدانهای نیرو و سرورهای مربوطه برای تهیه فایل توپولوژی را بشناسد.
- ۳-۲- اطلاعات مورد نیاز از خروجیهای سرورها را استخراج و در نرم افزار گرومکس بکار گیرد.

جلسه یازدهم

هدف کلی: تهیه سیستمهای پلیمر-دارویی

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد

- ۳-۱- اطلاعات مختصاتی و توپولوژی اجزای سیستم را با هم ترکیب کند.
- ۳-۲- خطاهای پیش آمده احتمالی در طی شبیه سازی نانوحاملها را بشناسد و آنها را حل کند.

جلسه دوازدهم

هدف کلی: شبیه سازی نانوذرات دارویی

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد

- ۳-۱- پس از آماده سازی سیستم مراحل مربوط به شبیه سازی را بر روی آن انجام دهد.
- ۳-۲- پارامترهای شبیه سازی را برای سیستم مورد نظر تعریف کند.

جلسه سیزدهم

هدف کلی: آنالیز نانوحاملهای شبیه سازی شده

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد

- ۳-۱- آنالیزهای مورد نظر برای تشکیل نانوذرات را بر خروجی سیستم انجام دهد.
- ۳-۲- جزییات سیستم مولکولی را با آنالیزهای مناسب تحلیل کند.

جلسه چهاردهم

هدف کلی: آشنایی با روشهای شبیه سازی غشاهای زیستی

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد

- ۳-۱- پارامترهای توپولوژیک برای غشاها را تهیه کند.
- ۳-۲- به غشاهای زیستی مولکولهای دارویی یا پروتئینی اضافه کند و آنها را شبیه سازی کند.

جلسه پانزدهم

هدف کلی: آشنایی با روشهای شبیه سازی اعمال نیرو

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد

۳-۱- مختصات مولکولها را در جعبه شبیه سازی تغییر دهد.

۳-۲- به یک یا چند بخش از سیستم نیروی دلخواه را وارد کند.

جلسه شانزدهم

هدف کلی: کاربرد روشهای مدل سازی در شبیه سازی و تحلیل نانوساختارها

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد

۳-۱- با توجه به دانش کسب شده، برای سیستم مورد نظر خود یک بخش شبیه سازی رایانه ای طراحی کند.

۳-۲- تشخیص دهد که برای هر سیستم مولکولی چه سطحی از محاسبات و با چه انگیزه ای قابل استفاده است.

جلسه هفدهم

هدف کلی: امتحان پایان ترم

منابع:

روش تدریس :

سخنرانی، پرسش و پاسخ، بحث گروهی در بخش تئوری
انجام آزمایشات عملی هر جلسه در آزمایشگاه در بخش عملی

رسانه های کمک آموزشی

وایت برد، کامپیوتر جهت ارائه پاورپوینت و فیلم های آموزشی ، ویدیوپروژکتور

سنجش و ارزشیابی

آزمون	روش آزمون	نمره	تاریخ	ساعت
فعالیت های کلاسی	بحثهای کلاسی	۵		
انجام پروژه محاسباتی		۵		
آزمون پایان ترم	تشریحی	۱۰		

مقررات درس و انتظارات از دانشجو :

- از دانشجویان محترم انتظار می رود که با توجه به اهمیت درس و تنوع منابع و توجه به محدودیت زمانی جهت هر چه بهتر برگزار شدن این واحد درسی به نکات زیر توجه فرمایید .
- ۱ - حضور منظم و دقیق در کلاس های تئوری و عملی
 - ۲ - شرکت در فعالیتهای داخل کلاسی و بحث گروهی
 - ۴ - مطرح کردن سوالات جلسه قبل در ابتدای جلسه بعدی

جدول زمانبندی برنامه :

روز و ساعت جلسه: دوشنبه ۸-۱۰

جلسه	موضوع هر جلسه	مدرس	روش تدریس	وسیله کمک آموزشی
۱	تاریخچه و مقدمه محاسبات مولکولی	سجاد مرادی	سخنرانی . پرسش و پاسخ	وایت برد + ویدئو پروژکتور
۲	انواع روشهای محاسباتی، مزایا، معایب و کاربردها	سجاد مرادی	سخنرانی . پرسش و پاسخ ،	وایت برد + ویدئو پروژکتور
۳	آماده سازی فایل‌های مختصاتی برای شروع یک کار مدلسازی	سجاد مرادی	سخنرانی . پرسش و پاسخ کلاس عملی آزمایشگاه	وایت برد + ویدئو پروژکتور
۴	داکینگ مولکولی: آماده سازی مولکولها برای انجاء داکینگ	سجاد مرادی	سخنرانی . پرسش و پاسخ کلاس عملی آزمایشگاه	وایت برد + ویدئو پروژکتور
۵	داکینگ و آنالیز نتایج	سجاد مرادی	سخنرانی . پرسش و پاسخ کلاس عملی آزمایشگاه	وایت برد + ویدئو پروژکتور
۶	آشنایی با محیط لینوکس و نرم افزار گرومکس	سجاد مرادی	سخنرانی . پرسش و پاسخ انجام عملی آزمایش	وایت برد + ویدئو پروژکتور
۷	شروع کار با نرم افزار گرومکس و تهیه باکس حاوی مولکول حلال دهی شده	سجاد مرادی	سخنرانی . پرسش و پاسخ انجام عملی آزمایش	وایت برد + ویدئو پروژکتور
۸	خنثی سازی سیستم و ایجاد تعادل دمایی و فشاری	سجاد مرادی	سخنرانی . پرسش و پاسخ کلاس عملی آزمایشگاه	وایت برد + ویدئو پروژکتور
۹	انجام شبیه سازی و آنالیز نتایج	سجاد مرادی	سخنرانی . پرسش و پاسخ کلاس عملی آزمایشگاه	وایت برد + ویدئو پروژکتور
۱۰	روشهای تهیه فایل توپولوژی برای مولکولهای غیر پروتئینی	سجاد مرادی	سخنرانی . پرسش و پاسخ کلاس عملی آزمایشگاه	وایت برد + ویدئو پروژکتور
۱۱	تهیه سیستمهای پلیمر-دارویی	سجاد مرادی	سخنرانی . پرسش و پاسخ کلاس عملی آزمایشگاه	وایت برد + ویدئو پروژکتور
۱۲	شبیه سازی نانوذرات دارویی	سجاد مرادی	سخنرانی . پرسش و پاسخ کلاس عملی آزمایشگاه	وایت برد + ویدئو پروژکتور
۱۳	آنالیز نانوحاملهای شبیه سازی شده	سجاد مرادی	سخنرانی . پرسش و پاسخ کلاس عملی آزمایشگاه	وایت برد + ویدئو پروژکتور
۱۴	آشنایی با روشهای شبیه سازی غشاهای زیستی	سجاد مرادی	سخنرانی . پرسش و پاسخ	وایت برد + ویدئو پروژکتور

			کلاس عملی آزمایشگاه	پروژکتور
۱۵	آشنایی با روشهای شبیه سازی اعمال نیرو	سجاد مرادی	سخنرانی . پرسش و پاسخ کلاس عملی آزمایشگاه	وایت برد + ویدئو پروژکتور
۱۶	کاربرد روشهای مدل سازی در شبیه سازی و تحلیل نانوساختارها	سجاد مرادی	سخنرانی . پرسش و پاسخ کلاس عملی آزمایشگاه	وایت برد + ویدئو پروژکتور