



ЦЕНТЪР ЗА ОБУЧЕНИЕ – БАН

1000 София
ул. „Сердика“ № 4
<http://edu.bas.bg>

email: tdc-phd@cu.bas.bg
тел.: 02 987 31 67
02 979 52 60

Основна информация:

Име на курса: МОЛЕКУЛНО МОДЕЛИРАНЕ И МОЛЕКУЛНА ДИНАМИКА В СТРУКТУРА-БАЗИРАНИЯ ЛЕКАРСТВЕН ДИЗАЙН

Лектор: Доц. д-р Мирослав Рангелов

Телефон: 02 9606 161

Имейл: miroslav.rangelov@orgchm.bas.bg

Хорариум: 30 учебни часа

Анотация:

Курсът е посветен на основните методи на структура-базирания лекарствен дизайн, с особен акцент върху молекулния докинг като водещ инструмент за предсказване на взаимодействията между лиганд и биомишена. Представени са и основите на молекулното моделиране и молекулната динамика, които допълват докинга и позволяват по-надежден анализ на структурата, стабилността и поведението на биомолекулните комплекси. Разглеждат се теоретичните принципи, областите на приложение и ограниченията на тези подходи в контекста на компютърно-подпомогнатия дизайн на лекарства. Акцентът е поставен върху връзката между метода и практиката чрез примери, насочени към реални задачи в откриването и оптимизацията на нови лекарствени молекули. Курсът е предназначен за докторанти и млади учени с подготовка по химия и молекулярна биология.

Тематично съдържание на курса:

Модул 1: Основи на структура-базирания лекарствен дизайн

Модул 2: Молекулен докинг и молекулно моделиране

Модул 3: Молекулна динамика и приложение в лекарствения дизайн

Форми на обучение и оценяване:

Обучението се провежда под формата на лекции и практически занятия. Оценяването се осъществява чрез текуща работа по поставени задачи, участие в обсъждания и разработване на малък проект, свързан с приложение на разглежданите методи върху конкретен проблем.

Компетентности, придобити в резултат на обучението:

- 1) Познаване на основните принципи, подходи и области на приложение на структура-базирания лекарствен дизайн.
- 2) Разбиране на теоретичните основи, възможностите и ограниченията на молекулния докинг, молекулното моделиране и молекулната динамика.
- 3) Умение за подготовка, анализ и интерпретация на модели на взаимодействия между лиганди и биологични мишени.



ЦЕНТЪР ЗА ОБУЧЕНИЕ – БАН

1000 София
ул. „Сердика“ № 4
<http://edu.bas.bg>

email: tdc-phd@cu.bas.bg
тел.: 02 987 31 67
02 979 52 60

- 4) Способност за критична оценка на резултати, получени чрез изчислителни методи, и за прилагането им при задачи, свързани с откриване и оптимизация на лекарствени молекули.
- 5) Придобиване на базова подготовка за използване на съвременни компютърни подходи в научноизследователската работа в областта на лекарствения дизайн.

Литература:

- D. Frenkel B. Smit, Understanding molecular simulation from algorithms to applications
W. Azevedo, Docking Screens for Drug Discovery
G. L. Patrick, An Introduction to Medicinal Chemistry
A. R. Leach, Molecular Modelling: Principles and Applications

Допълнителна информация :

Необходими са предварителни знания по органична химия, биохимия, молекулярна биология и основи на физикохимията, както и умения за работа с компютърни програми и обработка на научни данни.