



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: **Компютърно-подпомогнат лекарствен дизайн (КПЛД)**

Лектор: акад. Илза Пъжева

Телефон: 0889223241

Имейл: rajeva@biomed.bas.bg

Хорариум: 30 учебни часа

Анотация (до 150 думи):

Курсът цели да запознае докторантите с основните принципи и методи при разработване на лекарствени съединения с компютърни подходи (известни също като *in silico* подходи за лекарствен дизайн). Тематиката е интердисциплинарна: използват се знания от фармакологията, молекулярната биология, органичната и квантовата химия, молекулната механика, математическото моделиране. В програмата се разглеждат лиганд- и структура- базирани методи. Стремешът е да се охарактеризира връзката между химическата структура на съединенията и проявявания от тях ефект, изразена чрез молекулни модели (2D или 3D), като ефектът може да бъде лекарствен (терапевтичен), токсичен и др. Целта е, от една страна, по-доброто разбиране и вникване в молекулните механизми, водещи до проявявания ефект, а от друга – предсказване на ефекта чрез тези модели. В практически план докторантите ще се запознаят със съвременни софтуерни програми за молекулно моделиране, генериране на структури, оптимизация, изчисляване на структурни описатели, извеждане на QSAR (количествени зависимости структура-активност) модели, докинг, анализ на лиганд-белтъчни взаимодействия и др.

Тематично съдържание на курса (кратко описание по теми или модули):

Тема / Модул 1: Основни теоретични постановки

Тема / Модул 2: Лиганд-базирани методи

Тема / Модул 3: Структура-базирани методи

Форми на обучение и оценяване:

- Текущо оценяване: Семинари с презентации по избрана от докторанта тема по преподадения материал
- Финално оценяване: а/ Тест с избор на отговор/и; б/ Събеседване по теста

Компетентности, придобити в резултат на обучението (3-5 точки):

1. Придобиване на теоретични знания за полето на КПЛД
2. Усвояване на някои основни методи на КПЛД
3. Придобиване на известни практически умения

Литература:

<http://onlinelibrary.wiley.com/bookseries/10.1002/SERIES6138>

[QSAR: Hansch Analysis and Related Approaches](#)



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

[Chemometric Methods in Molecular Design](#)

[Advanced Computer-Assisted Techniques in Drug Discovery, Second Edition](#)

[Molecular Modeling: Basic Principles and Applications](#)

[Molecular Descriptors for Chemoinformatics: Volume I: Alphabetical Listing / Volume II: Appendices, References](#)

[Virtual Screening: Principles, Challenges, and Practical Guidelines](#)

Допълнителна информация:

- Желателно е курсистът да има интердисциплинарна насоченост
- Курсът може да се провежда on-line