



КОНСПЕКТ ПО КОМПЮТЪРНИ МЕТОДИ ВЪВ ФАРМАЦИЯТА

1. Въведение в компютърните методи във фармацията. Цели, задачи и използвани методи.
2. Съвременни научни тенденции при прилагането на компютърните методи във фармацията.
3. Класификация и структура на биомолекулите.
4. Връзка между строеж и функция на биомолекулите.
5. Компютърни технологии в обмяната на научна информация.
6. Компютърно описание на химичните съединения. Подходи и идентификатори на химичните съединения.
7. Бази данни за химични съединения, биомолекули и потенциални лекарствени вещества. Малки органични молекули с потенциално приложение във фармацията.
8. Приложение на изкуствения интелект при компютърно асистирания разработка на лекарства- същност, примери и приложение.
9. Приложение на методите на теоретичната химия за изследването на структурата и свойствата на малки органични молекули и биомолекули.
10. *In silico* методи за анализ и оценка на малки органични молекули и биомолекули.
11. QSAR - анализ на връзката “структура-свойства”. Дескриптори, описващи структурните и физикохимични характеристики на химичните съединения.
12. Използване на специализиран софтуер за работа с биомолекули (PyMOL, AutoDock Vina и/или Schrodinger)-същност, цели и задачи.

Изготвил: ас. Николай Тошев, дх

Утвърдил: доц. Стела Димитрова, дб