



КОНСПЕКТ ПО МОЛЕКУЛЯРЕН ДОКИНГ

1. Въведение в компютърните методи във фармацията. Цели, задачи и използвани методи.
2. Компютърно подпомаган лекарствен дизайн и молекулярен докинг.
3. Биологични мишени и лиганди: структура и взаимодействия.
4. Основни принципи на молекулярния докинг.
5. Софтуерни продукти за молекулярен докинг.
6. Видове докинг и изчислителни подходи.
7. Подготовка на протеина и лиганда за докинг.
8. Анализ и интерпретация на резултатите от докинг.
9. Комбиниране на докинга с други компютърни методи използвани в разработката на лекарства.
10. Съвременни научни тенденции и бъдещи перспективи пред молекулярния докинг и компютърните методи във фармацията.

Изготвил: ас. Николай Тошев, дх

Утвърдил: доц. Стела Димитрова, дб