
МЕДИЦИНСКИ УНИВЕРСИТЕТ-ПЛОВДИВ
ФАРМАЦЕВТИЧЕН ФАКУЛТЕТ

ПРОГРАМА
ПО
МОЛЕКУЛЯРЕН ДОКИНГ

Приета от Катедрен съвет на 26.06.2026г.

Утвърдена от Факултетен съвет с Протокол № 7/15.07.2026 г.

Наименование на дисциплината

Молекулярен докинг

УЧЕБЕН ПЛАН

Дисциплина	Изпит в семестър	По план на ФФ на МУ-Пловдив Часове				Кредити	Часове по семестри	
							VI семестър	
		Аудиторни	Лекции	Упражнения	Извънаудиторни		Л	У
Молекулярен докинг	VI	20	10	10	20	2	10	10

МОЛЕКУЛЯРЕН ДОКИНГ

Вид на дисциплината съгласно ЕДИ:

Свободноизбираема

Ниво на обучение:

Магистър /М/

Форми на обучение:

Лекции, практически упражнения и самоподготовка

Продължителност на обучението:

Един семестър, 20 часа

Хорариум:

10 часа лекции, 10 часа практически упражнения

Помощни средства за преподаване:

Лекции с мултимедийно представяне, използване на компютърни програми с цел запознаване с възможностите на различни *In silico* методи за изследването на малки органични молекули и биомолекули с потенциално приложение във фармацията. Самостоятелна подготовка и защита на курсова работа.

Формиране на оценката:

Оценката се формира от текущия контрол и резултата от разработената и защитена курсова работа.

Аспекти при формиране на оценката:

Работа на студента по време на лекции и практически упражнения. Актуалност, всеобхватност и задълбоченост при подготовката на курсовата работа, резултати от проведената защита на курсовата работа.

Семестриален изпит:

Да /разработване и защита на курсова работа/, VI- семестър

Държавен изпит:

Не

Водещ преподавател:

Преподавател от Катедрата по биоорганична химия

Катедра:

Катедра по Биоорганична химия

Език на преподаване:

Български език

АНОТАЦИЯ

Учебната дисциплина „Молекулярен докинг” е една от избираемите дисциплини в курса на обучение на студентите от специалност Фармация. Програмата на дисциплината „Молекулярен докинг” цели да задълбочи и интегрира придобитите знания и практически умения на студентите по Фармация по следните задължителни дисциплини: „Обща и неорганична химия“, „Аналитична химия“, „Физикохимия с колоидна химия“, „Органична химия“, „Биохимия“, „Фармацевтична химия“, „Фармацевтичен анализ“, „Фармакология“, както и по свободноизбираемата дисциплина „Компютърни методи във фармацията“.

Дисциплината е насочена към въвеждането на студентите в основните принципи на молекулярния докинг като съвременен *in silico* подход за моделиране и анализ на взаимодействията между малки органични молекули и биологични мишени. В рамките на курса студентите ще придобият базови знания и практически умения, свързани с подготовката на лиганди и рецептори, провеждането на докинг симулации, анализ на получените резултати и интерпретацията на молекулните взаимодействия в контекста на рационалния лекарствен дизайн. Дисциплината „Молекулярен докинг“ представлява логично продължение на базовия въвеждащ свободноизбираем курс по „Компютърни методи във фармацията“ и е насочена към по-задълбоченото интегриране на компютърните подходи във фармацевтичното обучение. По този начин курса въвежда студентите в един от основните етапи от съвременния рационален лекарствен дизайн и приложението на компютърните методи при разработката на нови биологично активни молекули. Преминавайки през курса на обучение по дисциплината „Молекулярен докинг” в края на курса на обучение, всеки студент следва да притежава следните знания, умения и компетентности:

Знания за:

- ✓ основните принципи на молекулярния докинг и мястото му сред съвременните *in silico* методи в рационалния лекарствен дизайн;
- ✓ основните типове взаимодействия между лекарствени молекули и биологични мишени, включително водородни връзки, хидрофобни взаимодействия, електростатични взаимодействия, π - π взаимодействия;
- ✓ структурата и особеностите на таргетни биологични макромолекули;
- ✓ основните етапи при подготовката на лиганди и рецептори за докинг;
- ✓ принципите на докинг алгоритмите, класирането на получените докинг пози;

- ✓ възможностите и ограниченията на молекулярния докинг като метод за прогнозиране на молекулни взаимодействия;

Умения за:

- ✓ търсене, избор и експорт на информация за потенциални биологични мишени от Protein Data Bank;
- ✓ подготовка на лигандни молекули за докинг изследвания;
- ✓ подготовка на рецептор за докинг изследвания;
- ✓ провеждане на докинг симулации с подходящ софтуер;
- ✓ анализ на получените докинг пози, енергии на свързване, както и основни лиганд-рецепторни взаимодействия;
- ✓ визуализация на молекулни комплекси;
- ✓ формулиране на изводи относно потенциална активност и селективност на изследваните молекули;

Компетентности за:

- ✓ работа със специализиран докинг софтуер;
- ✓ самостоятелно планиране и изпълнение на молекулярно докинг изследване;
- ✓ интерпретиране на молекулните взаимодействия;
- ✓ изграждане на междупредметна връзка между фундаменталните знания по химия, биохимия, фармакология и тяхното приложение в компютърно подпомагания лекарствен дизайн;
- ✓ научно мислене и подход при формулирането на цели и задачи;
- ✓ самостоятелна разработка на курсова работа;
- ✓ внедряване на резултатите в научни и научно-приложни изследвания;
- ✓ комбиниране на изчислителни подходи за решаване на фармацевтични задачи;

За постигането на **основната цел** ще бъдат прилагани следните методи за обучение:

- ✓ Лекции;
- ✓ Практически упражнения;
- ✓ Самостоятелна работа;
- ✓ Индивидуални и групови консултации;

СЪДЪРЖАНИЕ НА УЧЕБНАТА ПРОГРАМА НА ЛЕКЦИОНЕН КУРС ПО МОЛЕКУЛЯРЕН ДОКИНГ

№	ТЕМА	Брой часове
	VI- семестър	10
1	Въведение в компютърните методи във фармацията. Цели, задачи и използвани методи. Компютърно подпомаган лекарствен дизайн и молекулярен докинг.	2
2	Биологични мишени и лиганди: структура и взаимодействия. Основни принципи на молекулярния докинг. Софтуерни продукти за молекулярен докинг.	2
3	Видове докинг и изчислителни подходи.	2
4	Подготовка на протеина и лиганда за докинг. Анализ и интерпретация на резултатите от докинг. Комбиниране на докинга с други компютърни методи използвани в разработката на лекарства.	2
5	Съвременни научни тенденции и бъдещи перспективи пред молекулярния докинг и компютърните методи във фармацията.	2
	Общо за VI семестър:	10

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.

СЪДЪРЖАНИЕ НА УЧЕБНАТА ПРОГРАМА НА ПРАКТИЧЕСКИ УПРАЖНЕНИЯ ПО МОЛЕКУЛЯРЕН ДОКИНГ

№	ТЕМА	Брой часове
	VI- семестър	10
1	Въведение в компютърните методи във фармацията. Цели, задачи и използвани методи. Компютърно подпомаган лекарствен дизайн и молекулярен докинг.	2
2	Биологични мишени и лиганди: структура и взаимодействия. Основни принципи на молекулярния докинг. Софтуерни продукти за молекулярен докинг.	2
3	Видове докинг и изчислителни подходи.	2
4	Подготовка на протеина и лиганда за докинг. Анализ и интерпретация на резултатите от докинг. Комбиниране на докинга с други компютърни методи използвани в разработката на лекарства.	2
5	Съвременни научни тенденции и бъдещи перспективи пред молекулярния докинг и компютърните методи във фармацията.	2
	Общо за VI- семестър:	10

УЧЕБНА ЛИТЕРАТУРА

1. Leach, A.R., 2001. Molecular modelling: principles and applications. Pearson education
2. Altalhi, T., Cruz, J.N. and Refat, M.S.E.D. eds., 2022. Drug Design Using Machine Learning. John Wiley & Sons
3. Sliwoski, G., Kothiwale, S., Meiler, J. and Lowe, E.W., 2014. Computational methods in drug discovery. Pharmacological reviews, 66(1), pp.334-395.
4. Clent, B.A., Wang, Y., Britton, H.C., Otto, F., Swain, C.J., Todd, M.H., Wilden, J.D. and Tabor, A.B., 2021. Molecular docking with open access software: development of an online laboratory handbook and remote workflow for chemistry and pharmacy master's students to undertake computer-aided drug design. Journal of Chemical Education, 98(9), pp.2899-2905.
5. Muegge, I. and Rarey, M., 2001. Small molecule docking and scoring. Reviews in computational chemistry, 17, pp.1-60.
6. Kitchen, D.B., Decornez, H., Furr, J.R. and Bajorath, J., 2004. Docking and scoring in virtual screening for drug discovery: methods and applications. Nature reviews Drug discovery, 3(11), pp.935-949.
7. Pagadala, N.S., Syed, K. and Tuszynski, J., 2017. Software for molecular docking: a review. Biophysical reviews, 9(2), pp.91-102.

НАУЧНИ СПИСАНИЯ

8. Journal of Computer-Aided Molecular design, <https://link.springer.com/journal/10822>
9. Journal of Chemical Information and Modeling, <https://pubs.acs.org/journal/jcisd8>
10. Journal of Cheminformatics, <https://jcheminf.biomedcentral.com/>
11. Journal of Medicinal Chemistry, <https://pubs.acs.org/journal/jmcmr>

12. European Journal of Medicinal Chemistry, <https://www.sciencedirect.com/journal/european-journal-of-medicinal-chemistry>
13. Journal of Molecular Modeling, <https://link.springer.com/journal/894>
14. Drug discovery today, <https://www.sciencedirect.com/journal/drug-discovery-today>

гр. Пловдив, 16 юни 2026 г.

Изготвил програмата:

Асистент Николай Тошев, дх

Съгласувал програмата:

Доц. Стела Димитрова, дб

Ръководител на Катедра по Биоорганична химия

Програма е приета на Катедрен съвет с Протокол № 39/ 26.06.2026 г.

Утвърдена с Протокол от ФС № 7/15.07.2026г.