



МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
КАФЕДРА МЕДИЧНОЇ ХІМІЇ



Вибіркова освітня компонента

«Молекулярний дизайн потенційних АФІ»

освітньо-наукової програми Фармація PhD
спеціальності 226 Фармація, промислова фармація





Вибіркова освітня компонента «Молекулярний дизайн потенційних АФІ»

Для кого призначена?

Запропонована вибіркова освітня компонента «Молекулярний дизайн потенційних АФІ» розроблений для здобувачів третього освітньо-наукового рівня вищої освіти освітньої програми Фармація PhD спеціальності 226 Фармація, промислова фармація

Для чого потрібен майбутньому фахівцю?

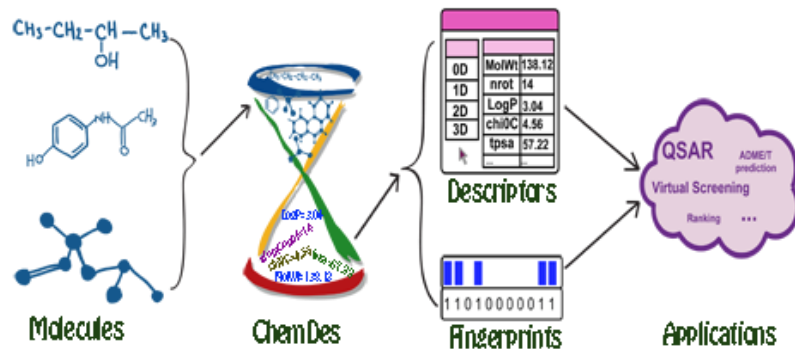
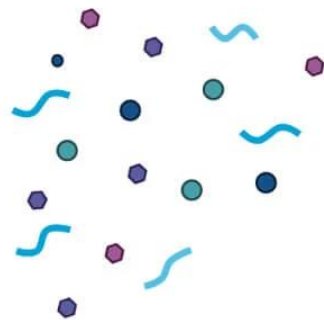
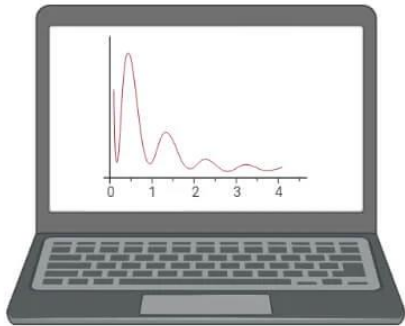
Вивчення даної компоненти полягає в освоєнні теоретичної бази методів комп'ютерного молекулярного моделювання потенційних АФІ з метою його застосування для оптимізації експериментального пошуку нових активних фармацевтичних інгредієнтів.

Основними завданнями освітньої компоненти

- розкриття ролі комп'ютерного молекулярного моделювання потенційних АФІ для пошуку нових активних фармацевтичних інгредієнтів; його значення для сучасної медичної хімії та фармакології;
- формування у здобувачів вищої освіти знань і умінь, що дозволяють прогнозувати на основі структури перспективні види біологічної активності, токсичності та параметрів біодоступності;
- розгляд та освоєння основних типів, прийомів, методів та областей застосування програмного забезпечення, що використовується в комп'ютерному молекулярному моделюванні потенційних АФІ.

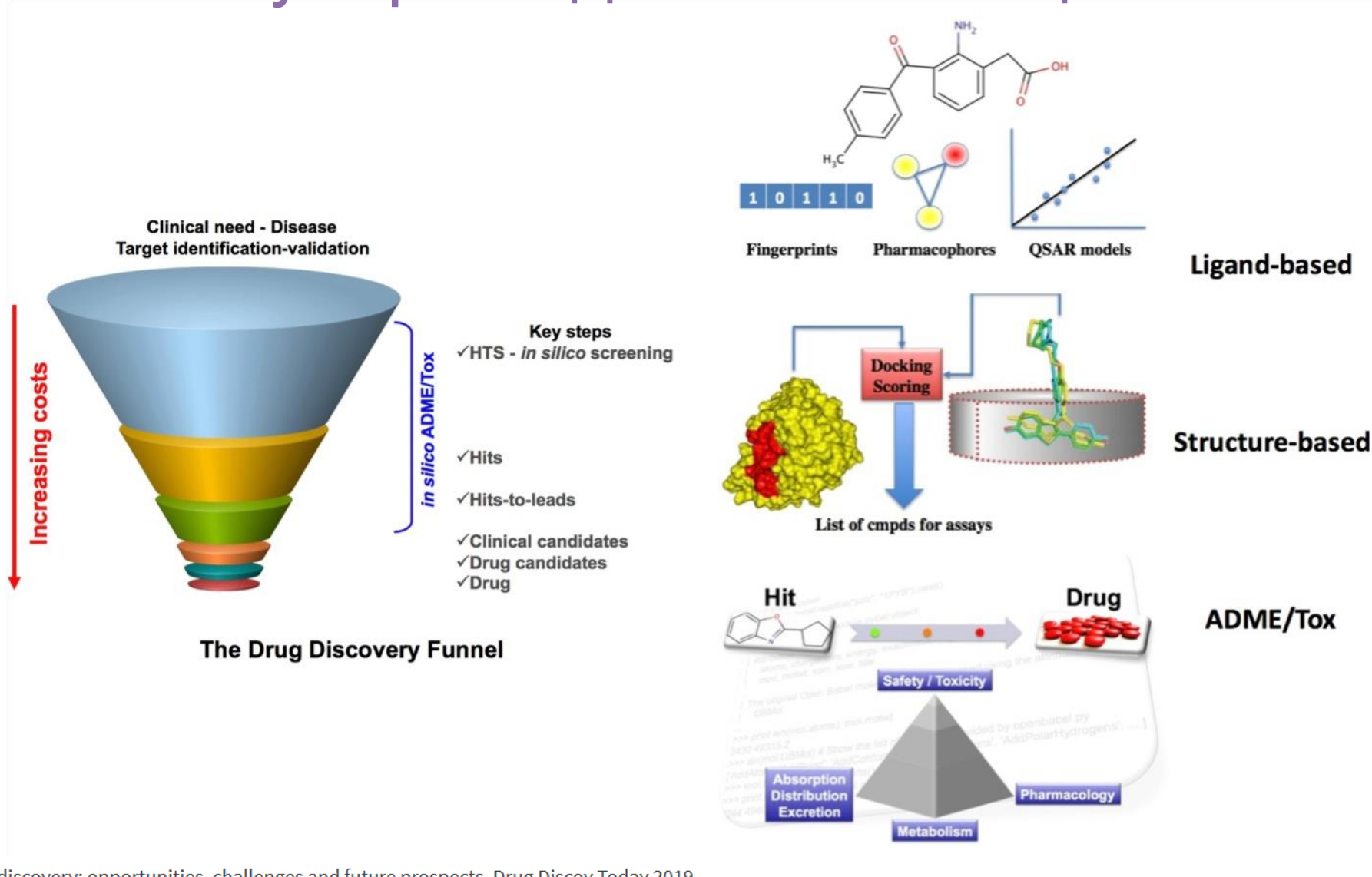
Що вивчає освітня компонента «Молекулярний дизайн потенційних АФІ»

Computer-Aided Drug Design (CADD)



1. Введення в хемоінформатику.
2. Види представлення хімічних об'єктів.
3. Види представлення хімічних об'єктів.
4. Хімічні бази даних.
5. Хемоінформаційні дескриптори.
6. Моделювання "структура-активність" і "структура-властивість"
7. Класичний QSAR
8. Віртуальний скринінг і молекулярний докінг

Що вивчає освітня компонента «Молекулярний дизайн потенційних АФІ»



ДЯКУЮ ЗА УВАГУ!



Національний фармацевтичний університет
вул. Пушкінська, 53, м. Харків, 61002

E-mail: mail@nuph.edu.ua
<https://nuph.edu.ua>