

# PRINCIPII DE DESIGN SI ANDOCARE MOLECULARĂ

## Adresabilitate

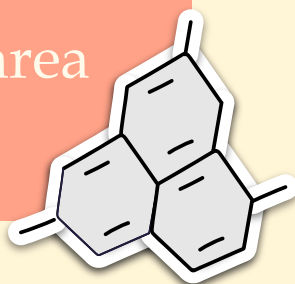
Cursul se adresează studenților **anului II** ai programului de studii Farmacie



Sursa imagine: <https://storyset.com/>

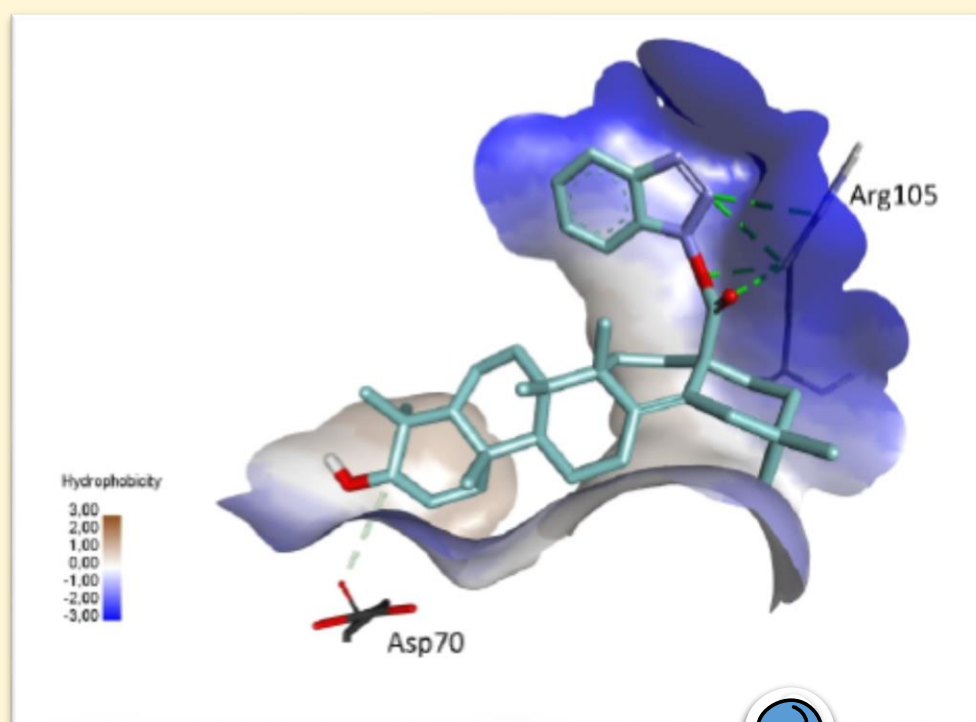
## Conținutul cursului

1. Noțiuni introductive despre andocare moleculară și screening virtual
2. Moduri de reprezentare a identității compusilor chimici. Parametrii 2D ai compusilor chimici.
3. Liganzi. Generarea de structuri moleculare 2D și 3D. Optimizarea structurilor 3D.
4. Proteine țintă. Prelucrarea proteinelor ca structuri adecvate pentru andocare. Baze de date cu structuri proteice 3D.
5. Principii de andocare moleculară rigidă. Programe de andocare moleculară. Funcții de scor
6. Noțiuni generale cu privire la interacțiunea proteină-ligand
7. Interpretarea și reprezentarea grafică a rezultatelor.



## Scop

Cursul oferă posibilitatea de acumulare a cunoștințelor teoretice necesare dezvoltării profesionale proprii, în special în domeniul de cercetare a noi produse medicamentoase.



## Competențe dobândite

1. cunoașterea aspectelor privind rolul andocării moleculare și a screeningului virtual în cercetarea de noi candidați cu potențial de medicament
2. cunoașterea instrumentelor necesare disponibile, pentru implementarea fluxului de lucru necesar pentru screening virtual
3. capacitatea de a selecta candidați moleculari pe baza interpretării rezultatelor andocării moleculare
4. cunoașterea implicațiilor în dezvoltarea de noi structuri medicamentoase

