

ДОКТОРСКА ПРОГРАМА

ПО ТЕОРЕТИЧНА (ВКЛ. ИЗЧИСЛИТЕЛНА) ХИМИЯ

Теоретичната химия е широка област на химията, включваща няколко самостоятелно обособени дисциплини като изчислителна химия, молекулно моделиране, молекулна механика, молекулна динамика, квантова химия, химична информатика (хемоинформатика). Тъй като всички тези дисциплини намират приложение при създаването на лекарства, т.нар. лекарствен дизайн, теоретичната химия се изучава във Фармацевтичния факултет на Медицински университет – София като докторска програма, включваща обучение по инструментариума на лекарствения дизайн. Методите на теоретичната химия се прилагат за изучаване на малки молекули и биомолекули със значение за фармацията.

Цели на докторската програма:

- Основната цел на обучението по докторската програма по теоретична (вкл. изчислителна) химия е да се подготвят висококвалифицирани специалисти, способни да решават учебни, научни и приложни задачи в областта на теоретичната химия и лекарствения дизайн, за нуждите на медицинските университети и други висши училища, както и за нуждите на компаниите за клинични изследвания на нови лекарства и ваксини.

- Друга важна цел на обучението е да се дадат разширени и задълбочени теоретични познания в различни направления на теоретичната химия, като по-специално внимание се обръща на тяхното приложение при създаването на нови лекарства и ваксини.

Задачите в процеса на обучение на докторантите са:

- Да усвоят основните подходи и методи на теоретичната химия, намиращи приложение при създаването на нови лекарства и ваксини.

- Да придобият знания и умения за дизайн и изпълнение на научно-изследователски проект – от дефинирането на целта, задачите, обекта и методите на изследването, през получаване и тълкуване на резултати до оформянето на тези резултати в научна публикация и презентирането им на научен форум.

- Да придобият умения за работа със съвременни бази данни и източници на научна информация като Web of Science, Pubmed, Uniprot, Protein Data Bank, както и за систематизиране и анализ на литературни данни.

- Да придобият умения за работа със специализиран софтуер за молекулно моделиране, лекарствен дизайн, анализ на връзки структура – активност, анализ на взаимодействия лекарство – макромолекула.

- Да придобият умения за работа в екип, отговорност, изпълнение на задачите в срок, креативност и умение за вземане на решения.

Научноизследователската работа по докторската програма се основава предимно на използването на *in silico* методи за анализ и оценка. Катедра „Химия“ разполага с широк набор от специализиран софтуер за:

- молекулно моделиране и оптимизиране на молекулната геометрия на малки молекули и протеини – ACDLabs, HyperChem, YASARA, MOE, PyMOL;
- молекулен докинг – GOLD;
- молекулна динамика – MOE;
- анализ на връзката структура – активност (QSAR) - SIMCA, MDLQSAR.

Обучението на докторантите по теоретична (вкл. изчислителна) химия се провежда в секцията по физикохимия към катедра „Химия“. Секцията разполага с 4 кабинета, оборудвани с 10 високоскоростни компютри и 1 работна станция. За докторантите има осигурени работни места с компютри и софтуер. Секцията разполага с 2 безсрочни лиценза за GOLD и 1 тригодишен лиценз за MOE. Не се налага използването на материална база извън Фармацевтичен факултет.

Основни научни направления, теми и водещи изследователи

Направление „Лиганд-базиран лекарствен дизайн”
<i>Тема: Количествени зависимости между химична структура и фармакокинетично поведение – доц. д-р Цветанка Живкова</i>
<i>Тема: Количествени зависимости между химична структура и биологична активност – гл. ас. д-р Ива Вълкова</i>
Направление „Рецептор-базиран лекарствен дизайн”
<i>Тема: Молекулен докинг – проф. Ирини Дойчинова, дхн, и гл. ас. д-р Марияна Атанасова</i>
<i>Тема: Молекулна динамика – проф. Ирини Дойчинова, дхн,</i>
Направление „Хемо- и биоинформатика”
<i>Тема: Протеохемометрика – проф. Ирини Дойчинова, дхн, и доц. Иван Димитров</i>
<i>Тема: Имуноинформатика – проф. Ирини Дойчинова, дхн, и доц. Иван Димитров</i>

За повече информация:

проф. Ирини Дойчинова, дхн

Катедра „Химия“

Фармацевтичен факултет

Тел.: 02 9236506

Email: idoytchinova@ddg-pharmfac.net