



MISKOLCI EGYETEM
Műszaki Anyag- és Vegyészmérnöki Kar
Kerpely Antal Anyagtudományok és
Technológiák Doktori Iskola



Molekuláris tervezés és dokkolás

Fiser Béla

TANTÁRGYLEÍRÁS

2024.
Szerző: Fiser Béla

Molekuláris tervezés és dokkolás

Fiser Béla

Tantárgy jegyzője

Fiser Béla, tudományos főmunkatárs, Kémiai Intézet.
Szoba: Kémiai Intézet, B folyosó, B-3.
e-mail: bela.fiser@uni-miskolc.hu
tel: +36 46 565-111
www: <https://bodzalomb.wixsite.com/fiserb>

Tantárgy célcsoportja

A tantárgyat a Kerpely Antal Anyagtudományok és Technológiák Doktori Iskola minden hallgatójának ajánljuk, különös tekintettel a kémia és a számítógépes szimulációk iránt érdeklődő hallgatókra.

Tantárgy nyelve

Angol.

Tantárgy célja

A kurzus fő célja, hogy áttekintést adjon a hallgatóknak a molekuláris dokkolásról, és megtanítsa őket arra, hogyan használják ezeket a technikákat a legkülönbözőbb alkalmazásokban kiegészítve a kísérleti technikákat.

Tantárgy módszertana

A kurzus személyes előadások és gyakorlati foglalkozások keretében zajlik. Az előadások és a gyakorlatok úgy vannak felépítve, hogy átfogó ismereteket nyújtsanak különböző molekuláris dokkoláshoz kötődő megközelítésekről. A hallgatók ezután szoftvercsomagok segítségével megtanulják alkalmazni ezeket, lehetővé téve számukra, hogy tudásukat a gyakorlatban is alkalmazzák az őket érdeklő rendszerekre.

Tantárgy tematikája

- Molecular Docking.
- Molecular Docking software packages.
- Target identification and preparation.
- Ligand preparation.
- Applications in drug design.

Tantárgyhoz kapcsolódó irodalmak

Összefoglaló közlemények a témában például:

<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC3151162/pdf/nihms-308746.pdf>

<https://www.nature.com/articles/s41598-023-40160-2>

<https://link.springer.com/article/10.1007/s00706-023-03076-1>

Könyv a témában például:

Mohane S. Coumar (ed.): *Molecular Docking for Computer-Aided Drug Design Fundamentals, Techniques, Resources and Applications*. **2021** Academic Press (Elsevier) (ISBN: 978-0-12-822312-3)

<https://www.sciencedirect.com/book/9780128223123/molecular-docking-for-computer-aided-drug-design>.

Tantárgy teljesítése, számonkérés

Projektmunka.

Tantárgyhoz kapcsolódó komplex vizsga kérdések

1. Define molecular docking!
2. Describe the two main steps of molecular docking, posing and scoring.
3. Explain the rigid-rigid, rigid-flexible, and flexible-flexible docking scenarios and point out their potential applicability.
4. What is „blind docking” and how does it work?
5. How to apply molecular docking in drug design? Notable examples!