

## 5. Тематичний план практичних занять

№	Тема занять	К-сть годин	
		Ден. ф-ма навч.	Заочн. ф-ма навч.
<b>Змістовий модуль 1. Основні прийоми та принципи пошуку спеціалізованої інформації з використанням комп'ютерних технологій, фармація в мережі INTERNET.</b>			
1	Основні прийоми та принципи пошуку інформації у всесвітній мережі Інтернет. Пошукові сервери, система гіперпосилань. Підходи до оцінки надійності/достовірності інформації, системи «фільтрування інформації».	2	0,5
2	Фармацевтичні ресурси в мережі Інтернет. Бази даних фармацевтичної та медико-біологічної інформації та принципи пошуку, бібліографічні та повнотекстові бази наукових журналів, патентної інформації. Доступність інформації.	2	0,5
3	Практичне використання мережі Інтернет та електронних баз даних для пошуку інформації про лікарські засоби.	2	0,5
4	Пошук інформації про лікарські засоби і/або біологічно-активні сполуки на етапі доклінічних/клінічних досліджень, їх особливості, використання тощо.	2	0,5
<b>Разом</b>		<b>4</b>	<b>2</b>
<b>Змістовий модуль 2. Сучасні підходи та методологія створення інноваційних лікарських засобів (drug design – конструювання ліків).</b>			
5	Огляд «хімічних» програмних пакетів та їх функціональних можливостей. Представлення інформації про структуру органічних речовин.	2	0,5
6	Практичне використання програмного пакету Accelrys (ISIS) (Base, Draw) у фармації як повнофункціональної системи управління хімічними та фармацевтичними базами даних.	2	0,5
7	Оперування бібліотеками хімічних сполук. Використання хімічних редакторів для пошуку інформації у спеціалізованих базах даних.	2	0,5
8	Підходи до створення інноваційних лікарських засобів. Віртуальні бібліотеки, віртуальний скринінг – принципи, підходи та алгоритми, програмні пакети для реалізації етапів	2	0,5
9	Дизайн нових біологічно активних сполук на основі ліганд-, мішень-орієнтованого, «fragment-based» та «structure-based» дизайну.	2	0,5
10	Розрахунок молекулярних дескрипторів структури (правила Ліпінського). Можливості представлення інформації про молекулярну структуру та біологічні/фармакологічні ефекти реальних чи віртуальних сполук	2	0,5
11	Вивчення зв'язку структура-активність. Методологія проведення QSAR-аналізу та програмне забезпечення для її реалізації	2	0,5
12	Прогнозування активності на основі 2D подібності. Застосування програмного пакету ACDLabs та програмних модулів, доступних у мережі Інтернет у процесі віртуального скринінгу. Прогнозування метаболітів біологічно-активних сполук.	2	0,5
13	Практичне використання молекулярного моделювання (методи молекулярної механіки та напівемпіричні квантово-хімічні методи) для	2	0,5

	модельовання тривимірної структури молекул у процесі пошуку нових лікарських засобів.		
14	Молекулярний докінг як метод прогнозування оцінки зв'язування лігандів з біомакромолекулами, як потенційними мішенями для лікарських засобів. Кореляція з експериментальними даними.	2	0,5
15	Сполуки лідери. Підходи до оптимізації структури сполук лідерів , як етап створення ЛЗ	2	0,5
16	Від молекули до лікарського засобу: підходи віртуального скринінгу та drug design	2	0,5
<b>Разом</b>		<b>24</b>	<b>6</b>
<b>Змістовий модуль 3. Використання комп'ютерних технологій у практичній фармації</b>			
17	Використання комп'ютерних технологій для автоматизація робочих місць у аптеках, гуртових фармацевтичних фірмах. Приклади програмного забезпечення. Функціональні вимоги	2	1
18	Автоматизований маркетинговий аналіз пропозиції гуртових фірм. Функціональні можливості бази даних «Лікарські засоби» (Моріон). Е-аптека, можливості та реалії.	2	1
<b>Разом</b>		<b>4</b>	<b>2</b>
<b>Кількість годин практичних занять з дисципліни</b>		<b>36</b>	<b>10</b>