

ЗАТВЕРДЖЕНО  
на засіданні кафедри, протокол №1  
від «31» серпня 2023 р.

### КАЛЕНДАРНО-ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН

лекцій з навчальної дисципліни «Комп'ютерне моделювання у фармації»  
для студентів III курсу фармацевтичного факультету спеціальності «Фармація» на 5 семестр 2023/2024 н.р.

№ п/п	Тема заняття	Дата	№ групи
1	Основні прийоми та принципи пошуку спеціалізованої інформації її оцінки та аналізу. Фармація у всесвітній мережі INTERNET. Характеристика найважливіших баз даних хіміко-фармацевтичної та медико-біологічної інформації, бібліографічних та повнотекстових баз наукових журналів, патентної інформації тощо. Комп'ютерне програмне забезпечення, яке застосовується у практичній фармації.	04.09	1-3
2	Передумови впровадження інноваційних технологій у фармації (коротка історія розвитку підходів до створення лікарських засобів, успіхи та досягнення фармацевтичної та медичної хімії). Інноваційні технології в фармації – методологія drug-design (віртуальний скринінг, комбінаторна хімія, тотальний високоефективний скринінг, молекулярне моделювання). Основні стратегії створення лікарських засобів, етапи від молекули до препарату, роль і значення in silico методів. Поняття про молекулярні дескриптори, їх розрахунок, підходи та основи методів молекулярного моделювання та кількісної оцінки зв'язку структура-активність, докінгові дослідження. Поняття про сполуки-хіти, структури-лідери та їх оптимізацію.	18.09	1-3