

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

КАЛЕНДАРНО-ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН

лабораторних занять 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	Група / Дата		
		1	2	3
1	Офісні програмні пакети, ліцензування програмного забезпечення на Україні. Основні прийоми та принципи пошуку інформації у всесвітній мережі Інтернет. Пошукові сервери, система гіперпосилань. Підходи до оцінки надійності/достовірності інформації, системи «фільтрування інформації».	01.09	01.09	04.09
2	Фармацевтичні ресурси в мережі Інтернет. Бази даних фармацевтичної та медико-біологічної інформації та принципи пошуку по ним (MEDLINE, RXLIST, Реєстр лікарських засобів України тощо), бібліографічні та повнотекстові бази наукових журналів, патентної інформації для пошуку наукової фармацевтичної/медичної інформації (електронні бібліотеки). Доступність інформації.	08.09	08.09	11.09
3	Практичне використання мережі Інтернет та електронних баз даних для пошуку інформації про лікарські засоби	15.09	15.09	17.09
4	Пошук інформації про лікарські засоби і/або біологічно-активні сполуки на етапі доклінічних/клінічних досліджень, їх особливості, використання тощо.	22.09	22.09	25.09
5	Огляд хімічних програмних пакетів (Accelrys, CHEMOFFICE, ACDLabs тощо) та їх функціональних можливостей. Виконання ситуаційних задач за допомогою хімічних редакторів (Accelrys Draw, Chime, ChemWin, ACDLabs Sketch).	29.09	29.09	02.10
6	Практичне використання програмного пакету Accelrys (ISIS) (Base, Draw) у фармації як повнофункціональної системи управління хімічними та фармацевтичними базами даних.	06.10	06.10	09.10
7	Оперування бібліотеками хімічних сполук. Використання хімічних редакторів для пошуку інформації у спеціалізованих базах даних.	13.10	13.10	16.10
8	Новітні підходи до створення інноваційних лікарських засобів. Віртуальні бібліотеки, віртуальний скринінг – принципи, підходи та алгоритми, програмні пакети для реалізації етапів.	20.10	20.10	23.10
9	Сучасні підходи до дизайну нових біологічно активних сполук. Поняття про ліганд-, мішень-орієнтований, «fragment-base» дизайн, «structure-based» дизайн.	27.10	27.10	30.10

10	Розрахунок молекулярних дескрипторів структури (правила Ліпінського). Можливості представлення інформації про молекулярну структуру та біологічні/фармакологічні ефекти реальних чи віртуальних сполук..	03.11	03.11	06.11
11	Сучасні підходи до вивчення зв'язку структура-активність. Опрацювання методології проведення QSAR-аналізу та програмне забезпечення для їх реалізації.	10.11	10.11	13.11
12	Застосування програмного пакету ACDLabs та програми PASS C&T та програмних модулів, доступних у мережі Інтернет у процесі віртуального скринінгу для прогнозування активності віртуальних сполук (2D подібність). Оцінка фармакокінетичних параметрів та прогнозування метаболізму біологічно-активних сполук	17.11	17.11	20.11
13	Практичне використання молекулярного моделювання (методи молекулярної механіки та напівемпіричні квантово-хімічні методи) для моделювання тривимірної структури молекул у процесі пошуку нових лікарських засобів.	24.11	24.11	27.11
14	Застосування докінгового дослідження як методу прогнозування оцінки зв'язування лігандів з біомакромолекулами, як потенційними мішенями для лікарських засобів. Кореляція з експериментальними даними.	01.12	01.12	04.12
15	Оптимізація структури сполук лідерів.	08.12	08.12	11.12
16	Інші алгоритми та підходи віртуального скринінгу та drug design	08.12	08.12	11.12
17	Використання комп'ютерних технологій для автоматизація робочих місць у аптеках, гуртових фармацевтичних фірмах. Приклади програмного забезпечення. Функціональні вимоги	15.12	15.12	18.12
18	Автоматизований маркетинговий аналіз пропозиції гуртових фірм. Функціональні можливості бази даних «Лікарські засоби» (Моріон). Е-аптека, можливості та реалії.	15.12	15.12	18.12
Всього		36		