



Силабус дисципліни «Комп'ютерне моделювання у фармації»

1. Загальна інформація	
Назва факультету	Фармацевтичний факультет
Освітня програма (галузь, спеціальність, рівень вищої освіти, форма навчання)	22 Охорона здоров'я, 226 Фармація, другий (магістерський) рівень вищої освіти, денна форма
Навчальний рік	2023-2024
Назва дисципліни, код (електронна адреса на сайті ЛНМУ імені Данила Галицького)	Комп'ютерне моделювання у фармації, ОК 24
Кафедра (назва, адреса, телефон, e-mail)	Фармацевтичної, органічної і біоорганічної хімії, вул. Пекарська 69, тел. +38 (032) 275-59-66, 275-59-77, 278-64-3, 79010 Kaf_pharmchemistry@meduniv.lviv.ua
Керівник кафедри (контактний e-mail)	проф. Лесик Р.Б., dr_r_lesyk@org.lviv.net
Рік навчання (рік, на якому реалізується вивчення дисципліни)	3 курс
Семестр (семестр, у якому реалізується вивчення дисципліни)	5
Тип дисципліни/модулю (обов'язкова/ вибіркова)	Обов'язкова
Викладачі (імена, прізвища, наукові ступені і звання викладачів, які викладають дисципліну, контактний e-mail)	доц. Кришишин-Дилевич А.П. (kryshchyshyn.a@gmail.com), доц. Лозинський А.В. (lozynskyiandrii@gmail.com), доц. Голота С.М. (golota_serg@yahoo.com)
Erasmus так/ні (доступність дисципліни для студентів у рамках програми Erasmus+)	Ні
Особа, відповідальна за силабус (особа, якій слід надавати коментарі стосовно)	доц. Лозинський А.В., lozynskyiandrii@gmail.com

<i>силабуса, контактний e-mail)</i>	
Кількість кредитів ECTS	14
Кількість годин (<i>лекції/ практичні заняття/ самотійна робота студентів</i>)	90 (лекцій-4, практичних -36, СРС-50)
Мова навчання	Українська, англійська
Інформація про консультації	Консультації кожного четверга з 13 ⁰⁵ -15 ²⁰
Адреса, телефон та регламент роботи клінічної бази, бюро... (<i>у разі потреби</i>)	
2. Коротка анотація до курсу	
<p>Навчальна дисципліна «Комп'ютерне моделювання у фармації» належить до обов'язкових дисциплін циклу професійно-орієнтованої підготовки фахівців спеціальності «Фармація». Дисципліна базується на загальних закономірностях хімічних та медико-біологічних наук та дозволяє студентам оволодіти теоретичними основами та елементами використання комп'ютерних технологій у 4 фармації, розуміння цілісної картини «від ідеї до препарату», ознайомлення із сучасними підходами до створення інноваційних лікарських засобів.</p>	
3. Мета і цілі курсу	
<p>Метою викладання навчальної дисципліни є: оволодіння теоретичними основами та елементами використання комп'ютерних технологій у фармації, розуміння цілісної картини «від ідеї до препарату», ознайомлення із сучасними підходами до створення інноваційних лікарських засобів.</p> <p>Основні завдання полягають у:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. ознайомленні та практичних навиках використання мережі INTERNET чи електронних баз даних для професійної діяльності; 2. засвоєнні доступних пакетів комп'ютерних програм для майбутньої професійної діяльності. 3. ознайомленні та засвоєнні інноваційних підходів до створення лікарських засобів (віртуальний скринінг, молекулярне моделювання, докінг, QSAR-аналіз, оптимізація структури сполук-лідерів, комбінаторна хімія, високоефективний скринінг тощо) та програмного забезпечення для їх реалізації; 4. вивченні сучасних лікарських засобів, створених з використанням інноваційних технологій; <p>Компетентності та результати навчання, формуванню яких сприяє дисципліна (взаємозв'язок з нормативним змістом підготовки здобувачів вищої освіти, сформульованим у термінах результатів навчання у Стандарті вищої освіти).</p> <p>Згідно з вимогами Стандарту вищої освіти дисципліна забезпечує набуття студентами компетентностей:</p> <p>- загальні: ЗК2; ЗК6; ЗК11; ЗК12.</p> <p>- фахові: ФК 12; ФК 19; ФК 20</p>	
4. Пререквізити курсу	
<p>Міждисциплінарні зв'язки: біоорганічна та фармацевтична/медична хімія, біофізика, біохімія, нормальна та патологічна фізіологія, фармакологія, токсикологічна хімія.</p>	

5. Програмні результати навчання

Список результатів навчання

Код результату навчання	Зміст результату навчання	Посилання на код матриці компетентностей
<i>Зн-1</i>	Знати методи реалізації знань у вирішенні практичних питань;	<i>ПР2, ПР3</i>
<i>Зн-2</i>	структуру та особливості професійної діяльності;	<i>ПР5, ПР7,</i>
<i>Зн-3</i>	методи пошуку фармацевтичної інформації у глобальній мережі	<i>ПР12, ПР15, ПР16,</i>
<i>Зн-4</i>	компоненти системи охорони здоров'я, планування та оцінку наукового дослідження	<i>ПР17, ПР18, ПР19,</i>
<i>Зн-5</i>	основи системи права і фармацевтичного законодавства; - основні механізми державного регулювання фармацевтичної діяльності	<i>ПР20</i>
<i>Зн-6</i>	державне нормування якості лікарських засобів	
<i>Зн-7</i>	алгоритми створення лікарських засобів	
<i>Ум-1</i>	використовувати фахові знання для вирішення практичних ситуацій	
<i>Ум-2</i>	здійснювати професійну діяльність, що потребує оновлення та інтеграції знань	
<i>Ум-3</i>	забезпечувати якісне виконання професійної роботи	
<i>Ум-4</i>	пошук наукових джерел інформації; здійснювати вибір методик проведення наукового дослідження; використовувати методи математичного аналізу і моделювання, теоретичного і експериментального дослідження у фармації	

<i>Ум-5</i>	<p>користуватись нормативно-правовими актами, що регламентують фармацевтичну діяльність в Україні та за кордоном; - відстежувати та визначати зміни і доповнення у вітчизняному фармацевтичному законодавстві;</p> <p>- складати відомості про матеріально-технічну базу аптеки та аптечного пункту, а також організаційні документи, необхідні для їх діяльності;</p> <p>- формувати відносини з хворими та лікарями з метою виконання етичних критеріїв ВООЗ та принципів належної аптечної практики щодо просування лікарських засобів на ринку, мінімізації зловживання та невірного використання лікарських засобів</p>	
<i>К-1</i>	Встановлювати зв'язки із суб'єктами практичної діяльності	
<i>К-2</i>	Формувати комунікаційну стратегію у професійній діяльності	
<i>К-3</i>	Встановлювати зв'язки для забезпечення якісного виконання робіт	
<i>К-4</i>	Використовувати інформаційні дані з наукових джерел	
<i>К-5</i>	Формувати висновки та фахово застосовувати закони та нормативні документи	
<i>К-6</i>	Здійснювати контроль якості лікарських засобів та їх сертифікацію	
<i>К-7</i>	Розробляти методики контролю якості фармацевтичної продукції	
<i>АВ-1</i>	Нести відповідальність за своєчасність прийнятих рішень	
<i>АВ-2</i>	Нести відповідальність за професійний розвиток з високим рівнем автономності	
<i>АВ-3</i>	Нести відповідальність за якісне виконання робіт	
<i>АВ-3</i>	Нести відповідальність за розробку та реалізацію запланованих проектів	
<i>АВ-4</i>	Нести відповідальність за якісне та своєчасне використання нормативних документів у професійній діяльності	
<i>АВ-5</i>	Нести відповідальність за проведення сертифікації та запобігання розповсюдження фальсифікованих лікарських засобів	

AB-6	Нести відповідальність за валідність розроблених методик контролю якості			
6. Формат і обсяг курсу				
Формат курсу <i>(вказіть очний, або заочний)</i>	Очний, заочний			
Вид занять	Кількість годин		Кількість груп	
лекції	52		16	
практичні	216		16	
семінари	-			
самостійні	152		16	
7. Тематика та зміст курсу				
Код виду занять	Тема	Зміст навчання	Код результату навчання	Викладач
Л-1 (лекція-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.	Ознайомити студентів з основними прийомами та принципами пошуку спеціалізованої інформації її оцінки та аналізу	<i>Зн 1-4,6,8,9</i> <i>Ум 1,5,7-9,10,11</i>	доц. А.П. Крицишин-Дилевич
Л-2	Передумови впровадження інноваційних технологій у фармації (коротка історія розвитку підходів до створення лікарських засобів, успіхи та досягнення фармацевтичної та медичної	Ознайомити студентів із інноваційними технологіями у фармації методологія <i>drug-design</i> (віртуальний скринінг, комбінаторна хімія, тотальний високоефективний	<i>Зн 1-4,6,8,9</i> <i>Ум 1,5,7-9,10,11</i>	доц. А.П. Крицишин-Дилевич

	<p>хімії).Інноваційні технології в фармації – методологія <i>drug-design</i> (віртуальний скринінг, комбінаторна хімія, тотальний високоефективний скринінг, молекулярне моделювання). Основні стратегії створення лікарських засобів, етапи від молекули до препарату, роль і значення <i>in silico</i> 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.</p>	скринінг, молекулярне моделювання)		
<p>П-1 (практичне заняття 1)</p>	<p>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».</p>	<p>Ознайомити студентів із офісними програмними пакетами, ліцензуванням програмного забезпечення на Україні</p>	<p>Зн 1-4,6,8,9 Ум 1,5,7-9,10,11</p>	<p>Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.</p>
<p>П-2</p>	<p>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</p>	<p>Ознайомити студентів з фармацевтичними ресурсами в мережі Інтернет</p>	<p>Зн 1-4,6,8,9 Ум 1,5,7-9,10,11</p>	<p>Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.</p>

	пошуку наукової фармацевтичної/медичної інформації (електронні бібліотеки). Доступність інформації.			
П-3	Практичне використання мережі Інтернет та електронних баз даних для пошуку інформації про лікарські засоби	Ознайомити студентів з практичним використанням мережі Інтернет та електронних баз даних про ЛЗ	<i>Зн 1-4,6,8,9</i> <i>Ум 1,5,7-9,10,11</i>	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.
П-4	Пошук інформації про лікарські засоби і/або біологічно-активні сполуки на етапі доклінічних/клінічних досліджень, їх особливості, використання тощо.	Ознайомити студентів із алгоритмом пошуку інформації про лікарські засоби і/або біологічно-активні сполуки на етапі доклінічних/клінічних досліджень	<i>Зн 1-4,6,8,9</i> <i>Ум 1,5,7-9,10,11</i>	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.
П-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).	Ознайомити студентів із хімічними програмними пакетами (Accelrys, CHEMOFFICE, ACDLabs тощо)	<i>Зн 1-4,6,8,9</i> <i>Ум 1,5,7-9,10,11</i>	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.
П-6	Практичне використання програмного пакету Accelrys (ISIS) (Base, Draw) у фармації як повнофункціональної системи управління хімічними та фармацевтичними базами даних.	Ознайомити студентів із використанням програмного пакету Accelrys (ISIS) (Base, Draw) у фармації як повнофункціональної системи управління хімічними та фармацевтичними базами даних	<i>Зн 1-4,6,8,9</i> <i>Ум 1,5,7-9,10,11</i>	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.
П-7	Оперування бібліотеками хімічних сполук. Використання хімічних редакторів для пошуку інформації у спеціалізованих базах даних.	Ознайомити студентів із бібліотеками хімічних сполук. Використанням хімічних редакторів для пошуку інформації у спеціалізованих базах даних	<i>Зн 5, 9, 10</i> <i>Ум 2,3,4,6</i>	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.

П-8	Новітні підходи до створення інноваційних лікарських засобів. Віртуальні бібліотеки, віртуальний скринінг – принципи, підходи та алгоритми, програмні пакети для реалізації етапів.	Ознайомити студентів із новітніми підходами до створення інноваційних лікарських засобів	<i>Зн 1-4,6,8,9</i> <i>Ум 1,5,7-9,10,11</i>	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.
П-9	Сучасні підходи до дизайну нових біологічно активних сполук. Поняття про ліганд-, мішень-орієнтований, «fragment-base» дизайн, «structure-based» дизайн.	Ознайомити студентів із сучасними підходами до дизайну нових біологічно активних сполук	<i>Зн 1-4,6,8,9</i> <i>Ум 1,5,7-9,10,11</i>	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.
П-10	Розрахунок молекулярних дескрипторів структури (правила Ліпінського). Можливості представлення інформації про молекулярну структуру та біологічні/фармакологічні ефекти реальних чи віртуальних сполук..	Ознайомити студентів із розрахунком молекулярних дескрипторів структури (правила Ліпінського).	<i>Зн 1-4,6,8,9</i> <i>Ум 1,5,7-9,10,11</i>	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.
П-11	Сучасні підходи до вивчення зв'язку структура-активність. Опрацювання методології проведення QSAR-аналізу та програмне забезпечення для їх реалізації.	Ознайомити студентів із сучасними підходами до вивчення зв'язку структура-активність та опрацювання методології проведення QSAR-аналізу	<i>Зн 1-4,6,8,9</i> <i>Ум 1,5,7-9,10,11</i>	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.
П-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-	Ознайомити студентів із застосуванням 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)	<i>Зн 1-4,6,8,9</i> <i>Ум 1,5,7-9,10,11</i>	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.

	активних сполук			
П-13	Практичне використання молекулярного моделювання (методи молекулярної механіки та напівемпіричні квантово-хімічні методи) для моделювання тривимірної структури молекул у процесі пошуку нових лікарських засобів.	Ознайомити студентів із практичним використанням молекулярного моделювання (методи молекулярної механіки та напівемпіричні квантово-хімічні методи) для моделювання тривимірної структури молекул	<i>Зн 1-4,6,8,9</i> <i>Ум 1,5,7-9,10,11</i>	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.
П-14	Застосування докінгового дослідження як методу прогнозування оцінки зв'язування лігандів з біомакромолекулами, як потенційними мішенями для лікарських засобів. Кореляція з експериментальними даними.	Ознайомити студентів із застосуванням докінгового дослідження як методу прогнозування оцінки зв'язування лігандів з біомакромолекулами	<i>Зн 1-4,6,8,9</i> <i>Ум 1,5,7-9,10,11</i>	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.
П-15	Оптимізація структури сполук лідерів.	Ознайомити студентів із методами оптимізації структури сполук лідерів	<i>Зн 1-4,6,8,9</i> <i>Ум 1,2,5,7-9,10,11</i>	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.
П-16	Інші алгоритми та підходи віртуального скринінгу та drug design	Ознайомити студентів із іншими алгоритмами та підходами віртуального скринінгу та drug design	<i>Зн 1-4,6,8,9</i> <i>Ум 1,2,5,7-9,10,11</i>	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.
П-17	Використання комп'ютерних технологій для автоматизація робочих місць у аптеках, гуртових фармацевтичних фірмах. Приклади програмного забезпечення. Функціональні вимоги	Ознайомити студентів із використанням комп'ютерних технологій для автоматизація робочих місць у аптеках	<i>Зн 1-4,5,6,8,9</i> <i>Ум 1,5,7-9,10,11</i>	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.
П-18	Автоматизований маркетинговий аналіз пропозиції гуртових	Ознайомити студентів із автоматизованим маркетинговим	<i>Зн 1-4,6,8,9</i> <i>Ум 1,5,7-</i>	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-

	фірм. Функціональні можливості бази даних «Лікарські засоби» (Моріон). Е-аптека, можливості та реалії.	аналізом пропозиції гуртових фірм.	9,10,11	Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.
СРС-1 (самостійна робота 1)	Сучасні офісні програмні пакети (Microsoft Office, OpenOffice, StarOffice тощо), переваги та недоліки, умови їх ліцензування. Використання офісних програм (текстових редакторів, електронних таблиць, систем створення презентацій та систем управління базами даних) у фармації.	Ознайомити студентів із сучасними офісними програмними пакетами (Microsoft Office, OpenOffice, StarOffice тощо), перевагами їх та недоліками, умовами їх ліцензування	Зн 1-4,6,8,9 Ум 1,5,7-9,10,11	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.
СРС-2	Пошук інформації про лікарські засоби певної фармакологічної групи в мережі INTERNET за вказівкою викладача.	Ознайомити студентів із пошуком інформації про лікарські засоби певної фармакологічної групи в мережі INTERNET	Зн 1-4,6,8,9 Ум 1,5,7-9,10,11	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.
СРС-3	Пошук і систематизація інформації з бази даних MEDLINE за темою даною викладачем.	Ознайомити студентів із базою даних MEDLINE	Зн 1-4,6,8,9 Ум 1,5,7-9,10,11	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.
СРС-4	Комп'ютерні підходи у прогнозуванні токсичності та фармакокінетичних параметрів потенційних лікарських засобів.	Ознайомити студентів із комп'ютерними підходами у прогнозуванні токсичності та фармакокінетичних параметрів потенційних лікарських засобів	Зн 1-4,6,8,9 Ум 1,5,7-9,10,11	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.
СРС-5	Комбінаторна хімія та високоефективний фармакологічний скринінг як роботизовані сучасні підходи до пошуку лікарських засобів.	Ознайомити студентів із поняттям комбінаторної хімії та високоефективного фармакологічного скринінгу	Зн 1-4,6,8,9 Ум 1,5,7-9,10,11	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.
СРС-6	Поняття, класифікація та види молекулярних	Ознайомити студентів із поняттям,	Зн 1-4,6,8,9	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П.

	дескрипторів та їх використання у моделюванні залежностей «структура-активність»	класифікацією та видами молекулярних дескрипторів та їх використання у моделюванні залежностей «структура-активність»	<i>Ум 1,5,7-9,10,11</i>	Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.
СРС-7	Порівняльна характеристика алгоритмів та існуючого програмного забезпечення для докінгу.	Ознайомити студентів із методами молекулярного докінгу	<i>Зн 1-4,6,8,9</i> <i>Ум 1,5,7-9,10,11</i>	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.
СРС-8	Програмні пакети, що застосовуються для реалізації практичної діяльності провізора за кордоном	Ознайомити студентів із програмними пакетами, що застосовуються для реалізації практичної діяльності провізора за кордоном	<i>Зн 1-4,6,8,9</i> <i>Ум 1,5,7-9,10,11</i>	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.
СРС-9	Модель комплексного програмного продукту для забезпечення потреб у автоматизації роботи працівників за кордоном.	Ознайомити студентів із методами автоматизації роботи працівників у аптечних закладах	<i>Зн 1-4,6,8,9</i> <i>Ум 1,5,7-9,10,11</i>	Проф. Лесик Р,Б, доц. А.П. Крицишин-Дилевич, доц. Лозинський А.В., доц. Голота С.М.

8. Верифікація результатів навчання

Поточний контроль

здійснюється під час проведення навчальних занять і має на меті перевірку засвоєння студентами навчального матеріалу (необхідно описати форми проведення поточного контролю під час навчальних занять). Форми оцінювання поточної навчальної діяльності мають бути стандартизованими і включати контроль теоретичної та практичної підготовки. Остаточна оцінка за поточну навчальну діяльність виставляється за 4-ри бальною (національною) шкалою

Код результату навчання	Код виду занять	Спосіб верифікації результатів навчання	Критерії зарахування
<i>Зн 1-10</i> <i>Ум 1-11</i> <i>К 1-9</i> <i>АВ 1-8</i>	<i>Л-1-26</i> <i>П-1-72</i> <i>СРС1-71</i>	Видами навчальної діяльності студентів є: а) лекції б) практичні заняття в) самостійна робота студентів (СРС) Тематичні плани лекцій, практичних занять, СРС забезпечують реалізацію в	Критерії оцінювання Оцінка“відмінно”(5)- студент бездоганно засвоїв теоретичний матеріал теми заняття, демонструє глибокі і всебічні знання відповідної теми, основні положення наукових

		<p>навчальному процесі всіх тем, які входять до змісту програми.</p> <p>Лекційний курс складається з 2-х лекцій. Темі лекційного курсу розкривають проблемні питання відповідних розділів фармацевтичної хімії. Під час лекцій у студентів формуються теоретичні базові знання, забезпечується мотиваційний компонент і загально-орієнтовний етап оволодіння науковими знаннями під час самостійної роботи. У лекційному курсі максимально використовуються різноманітні дидактичні засоби – мультимедійні презентації, навчальні кінофільми, слайди.</p> <p>Практичні заняття спрямовані на контроль засвоєння теоретичного матеріалу, формування практичних вмінь та навичок, а також уміння аналізувати й застосовувати одержані знання для вирішення практичних завдань.</p> <p>Кожне заняття розпочинається з тестового контролю з метою оцінки вихідного рівня знань і визначення</p> <p>Ступеня готовності студентів до заняття. Викладач визначає мету заняття та створює позитивну пізнавальну мотивацію; відповідає на запитання студентів, які виникли під час СРС за темою заняття.</p> <p>Один із етапів заняття полягає у виконанні практичних робіт за вказівкою викладача.</p> <p>На заключному етапі заняття з метою оцінки засвоєння студентом теми йому пропонується дати відповідь на ситуаційні задачі.</p> <p>Викладач підводить підсумок заняття, дає студентам завдання для самостійної роботи, вказує на основні питання наступної теми і пропонує список рекомендованої літератури.</p>	<p>першоджерел та рекомендованої літератури, логічно мислить і буде відповідь, вільно використовує набуті теоретичні знання при аналізі практичного матеріалу, висловлює своє ставлення до тих чи інших проблем, демонструє високий рівень засвоєння практичних навичок.</p> <p>Оцінка “добре” (4) - студент добре засвоїв теоретичний матеріал заняття, володіє основними аспектами з першоджерел та рекомендованої літератури, аргументовано викладає його; володіє практичними навичками, висловлює свої міркування з приводу тих чи інших проблем, але припускається певних неточностей і похибок у логіці викладу теоретичного змісту або при виконанні практичних навичок.</p> <p>Оцінка “задовільно” (3) - студент в основному опанував теоретичними знаннями навчальної теми, орієнтується в першоджерелах та рекомендованій літературі, але непереконливо відповідає, плутає поняття, додаткові питання викликають у студента невпевненість або</p>
--	--	---	--

		<p>Тривалість практичного заняття складає дві академічні години.</p>	<p>відсутність стабільних знань; відповідаючи на питання практичного характеру, виявляє неточності у знаннях, не вміє оцінювати факти та явища, пов'язувати їх із майбутньою діяльністю, припускається помилок при виконанні практичних навичок.</p> <p>Оцінка“незадовільно”(2) - студент не опанував навчальний матеріал теми, не знає наукових фактів, визначень, майже не орієнтується в першоджерелах та рекомендованій літературі, відсутнє наукове мислення, практичні навички не сформовані.</p>
Поточна навчальна діяльність			
<p>Поточний контроль здійснюється під час проведення практичних занять і має на меті перевірку засвоєння студентами навчального матеріалу. Формами поточного контролю є:</p> <p>а) тестові завдання з вибором однієї правильної відповіді, з визначенням правильної послідовності дій, з визначенням відповідності, з визначенням певної ділянки на фотографії чи схемі («розпізнавання»); Контроль проводиться з використанням навчальної платформи Misa.</p> <p>б) індивідуальне усне опитування, співбесіда;</p> <p>в) розв'язання типових ситуаційних задач;</p> <p>д) контроль практичних навичок;</p> <p>Під час оцінювання засвоєння кожної теми за поточну навчальну діяльність студенту виставляються оцінки за 4-ри бальною (традиційною) шкалою. При цьому враховуються усі види робіт, передбачені програмою дисципліни.</p> <p>Виставлені за традиційною шкалою оцінки конвертуються у бали.</p> <p>Самостійна робота студента оцінюється на практичних заняттях і є складовою підсумкової оцінки студента.</p>			
Підсумковий контроль			
Загальна система	Проводиться по завершенню вивчення дисципліни у вигляді письмового		

оцінювання	екзамену.													
Шкали оцінювання	традиційна 4-бальна шкала, багатобальна (200-бальна) шкала, рейтингова шкала ECTS													
Умови допуску до підсумкового контролю	Студент відвідав усі практичні заняття і отримав не менше, ніж 72 балів за поточну успішність													
Вид підсумкового контролю	Екзамен	Критерії зарахування												
Критерії оцінювання залік														
залік	Залік – це форма підсумкового контролю засвоєння студентом теоретичного та практичного матеріалу з навчальної дисципліни. Підсумковий контроль проводиться у письмовій формі, з використанням навчальної платформи Misa, відповідно до розкладу. Триває 2 академічних години.	<i>Максимальна кількість балів – 200</i>												
залік														
<p>Максимальна кількість балів, яку може набрати студент за поточну навчальну діяльність для допуску до екзамену становить 200 балів.</p> <p>Мінімальна кількість балів, яку повинен набрати студент за поточну навчальну діяльність для допуску до екзамену становить 120 бали.</p> <p>Розрахунок кількості балів проводиться на підставі отриманих студентом оцінок за 4-ри бальною (національною) шкалою під час вивчення дисципліни, шляхом обчислення середнього арифметичного (СА), округленого до двох знаків після коми. Отримана величина конвертується у бали за багатобальною шкалою таким чином:</p> $x = \frac{CA \times 200}{5}$ <p>Для зручності наведено таблицю перерахунку за 200-бальною шкалою:</p> <p style="text-align: center;">Оцінка з дисципліни, яка завершується заліком визначається, як сума балів</p> <p>Бали з дисципліни незалежно конвертуються як в шкалу ECTS, так і в 4-бальну (національну) шкалу. Бали шкали ECTS у 4-бальну шкалу не конвертуються і навпаки.</p> <p>Бали студентів, які навчаються за однією спеціальністю, з урахуванням кількості балів, набраних з дисципліни ранжуються за шкалою ECTS таким чином:</p> <table border="1" style="margin-left: auto; margin-right: auto;"> <thead> <tr> <th>Оцінка ECTS</th> <th>Статистичний показник</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>A</td> <td>Найкращі 10 % студентів</td> </tr> <tr> <td>B</td> <td>Наступні 25 % студентів</td> </tr> <tr> <td>C</td> <td>Наступні 30 % студентів</td> </tr> <tr> <td>D</td> <td>Наступні 25 % студентів</td> </tr> <tr> <td>E</td> <td>Останні 10 % студентів</td> </tr> </tbody> </table> <p>Ранжування з присвоєнням оцінок „А”, „В”, „С”, „D”, „Е” проводиться для студентів даного курсу, які навчаються за однією спеціальністю і успішно завершили вивчення дисципліни.</p>			Оцінка ECTS	Статистичний показник	A	Найкращі 10 % студентів	B	Наступні 25 % студентів	C	Наступні 30 % студентів	D	Наступні 25 % студентів	E	Останні 10 % студентів
Оцінка ECTS	Статистичний показник													
A	Найкращі 10 % студентів													
B	Наступні 25 % студентів													
C	Наступні 30 % студентів													
D	Наступні 25 % студентів													
E	Останні 10 % студентів													

Бали з дисципліни для студентів, які успішно виконали програму, конвертуються у традиційну 4-ри бальну шкалу за абсолютними критеріями, які наведено нижче у таблиці:

Бали з дисципліни	Оцінка за 4-ри бальною шкалою
Від 170 до 200 балів	5
Від 140 до 169 балів	4
Від 139 балів до мінімальної кількості балів, яку повинен набрати студент	3
Нижче мінімальної кількості балів, яку повинен набрати студент	2

Оцінка ECTS у традиційну шкалу не конвертується, оскільки шкала ECTS та чотирибальна шкала незалежні.

Об'єктивність оцінювання навчальної діяльності студентів перевіряється статистичними методами (коефіцієнт кореляції між оцінкою ECTS та оцінкою за національною шкалою).

9. Політика курсу

Політика курсу визначається системою вимог до студента при вивченні дисципліни

“Комп’ютерне моделювання у фармації” ґрунтується на засадах академічної добросовісності. Студентам пояснюється цінність набуття нових знань, необхідність самостійного виконання всіх видів робіт, завдань, передбачених робочою програмою даної навчальної дисципліни. Відсутність посилань на використані джерела, фабрикавання джерел, списування, втручання в роботу інших студентів становлять приклади можливої академічної недобросовісності. Виявлення ознак академічної недобросовісності в роботі студента є підставою для її не зарахування викладачем, незалежно від масштабів плагіату чи обману. Літературні джерела можуть надаватись викладачем виключно в освітніх цілях без права передачі третім особам. Студенти заохочуються до використання інших літературних джерел, не передбачених рекомендованим списком.

10. Література

Обов’язкова

1. Крищишин, А. П., Камінський, Д. В., & Лесик, Р. Б. Створення інноваційних лікарських засобів (підходи та методологія drug design) – одне з ключових питань сучасної фармацевтичної освіти // *Журнал органічної та фармацевтичної хімії* – 2015. – 13, вип. 1ю – С. 49-58.
2. AP. Kryshchyshyn, DV. Kaminskyu, DV. Atamanyuk, RB. Lesyk Computer technologies in pharmacy – filling in the gaps in Ukrainian PharmD curriculum // *Currents in Pharmacy Teaching and Learning*. – 2015ю – Vol.7, Iss.4. P. 556–559.
3. Інформатика і комп’ютерна техніка. Комп’ютерні технології: Підручник для студентів вищих навчальних закладів (За ред. О.І. Пушкаря. К.:Видавничий центр “Академія”, 2002.-704 с.(Серія Альма-матер).
4. А. Кучер, Н. Гарбер, М.Баран. Світові медичні ресурси Інтернету (довідник). Київ. Здоров’я. 2003.- 336 с.
5. Орлов В.Д., Липсон В.В., Иванов В. В. Медицинская химия // Фолио.- 2005.- 464 С.
6. Краснокутский А.Б., Лагунова А.А. Фармакоэкономика. Т.1 / Системный анализ мирового фармацевтического рынка. – Научн. ред. Падалкин В.П. // М.: Классик-Консалтинг, 1998. – 344 с.
7. А.А.Рагойша Поиск химической информации в Интернете. Ч. I. Поисквые системы и тематические каталоги: Учеб. пособие для студ. хим. фак. – Мн.: БГУ, 2003.— 87 с.
8. Рагойша, А. А. Поиск химической информации в Интернете: научные публикации: учеб. пособие для студентов хим. фак. спец. 1-31 05 01 – Мн. : БГУ, 2007. — 71 с.
9. D.L.Banville Mining chemical structural information from the drug literature // *DDT*. – 2006. – Vol.11, N 1/2. – P. 36-42.
10. Sean Ekins. Computer applications in pharmaceutical research and development // Wiley.- 2006.- 806 p.
11. Bultinck P., De Winter H., Langenaeker W., Tollenaere J.P. Computational Medicinal Chemistry for Drug Discovery // New York.- Marcel Dekker Inc.- 2004.- 684 p.
12. Abraham D.J. Burgers Medicinal Chemistry and Drug Discovery. Vol. 1. Drug Discovery. // Wiley.- 2003.- 932 P.

13. Abraham D.J. *Burgers Medicinal Chemistry and Drug Discovery*. Vol. 2. Drug Discovery and Drug Development. // Wiley.- 2003.- 808 P.
14. Leach A.R. *Molecular Modelling: Principles And Applications*. // Pearson Education Limited.- 2001.- 744 P.
15. Spilker Bert. *Multinational pharmaceutical companies: Principles and practices* // New York.- Raven Press.-1994.- 804 p.
16. Zejc Alfred, Gorczyca Maria. *Chemia Lekow.* – Warszawa.: Wydawnictwo Lekarskie PZWL, 1998.-814 p.
17. Зефирова О.Н., Зефилов Н. С. Медицинская химия. II. Методологические основы создания лекарственных препаратов // Вестник Моск. Ун-та.- Сер.2.Химия.-2000.- Т.41.-№2.-С.103-108.
18. Зими́на Т., Батраков В. Комбинаторная химия: новые задачи органического синтеза // Химия и жизнь-XXI век. -1999. -№9. -С.20-22.
19. Walters W.P., Stahl M.A., Murko M. Virtual screening-an overview // *Drug Discovery Today*.-1998.- Vol.3.- №4.- P.160-178.
20. Paul Beroza, Mark Suto. Designing chiral libraries for drug design // *Drug Discovery Today*.-2000.-Vol.5.- №8.- p.364-372.
21. Поройков В. В. Компьютерное предсказание биологической активности веществ: пределы возможного // *Химия в России*.-1999. - №2.- С.8-12.
22. Станкевич М. И., Станкевич И. В., Зефилов Н. С. Топологические индексы в органической химии // *Успехи химии*.- 1988. - №3. - С.337-366.
23. Раевский О.А., Григорьев В.Ю.Количественное описание липофильности органических соединений на основе поляризуемости и акцепторной способности к образованию водородной связи // *Хим.-фармац. журн.* -1999. -Т.33, №5.– С.46-49.
24. Laura Robinson. In Silico ADME Screening – An Introduction. // *Lab Automation Article*, LionBioscience, Inc., www.lionbioscience.com
25. Glossary of Terms Used in Combinatorial Chemistry // *Pure Applied Chemistry*.- 1999.-Vol.71, №12.- P.2349-2365.
26. *Combinatorial & Solid Phase Organic Chemistry Handbook*.- Louisville, Kentucky: Advanced ChemTech Inc.- 1998.- 400 p.
27. Jin Li, Christopher Murray, Bohdan Waszkowycz, Stephen Young. Targeted molecular diversity in drug discovery: integration of structure-based design and combinatorial chemistry // *Drug Discovery Today*. -1998. - Vol.3, №3. - P.105-112.
28. Johnson D.E., Wolfgang G.H. Predicting human safety: screening and computational approaches // *Drug Discovery Today*.- 2000.-Vol.5,№10.- P.445-454.
29. Кієс-Kononovicz K. Wybrane zagadnienia z metod poszukiwania i otrzymywania srodkow leczniczych // *Krakow.: Wydawnictwo Uniwersytetu Jagiellonskiego*, 2000.- 318 s.
30. Розенблит А.Б., Голендер В.Е. Логико- комбинаторные методы в конструировании лекарств // *Рига: Зинатне*. -1983. –352 с.
31. Головенко М. Комбінаторна хімія: хемоінформатика // *Вісник фармакології і фармації*. -2001. - № 10. – С.11-14.
32. Jurgen Drews. Drug discovery today-and tomorrow // *Drug Discovery Today*. –2000. -Vol.5,№1. –P.3-5.
33. Nicholas W. Hird. Automated synthesis: new tools for the organic chemist // *Drug Discovery Today*. - 1999. - Vol.4,№6. - P.265-274.
34. Bolger R.Higt-throughput screening: new frontiers for the 21 st century.// *Drug Discovery Today*.-1999.- Vol.4,№6. - P.251-253.
35. Stuart L. Schreiber. Target-Oriented and diversity- oriented organic synthesis in drug discovery. *SCIENCE. Drug Discovery*. Vol.287 - 17 march 2000 - p.1964-1969.
36. Broughton. H.V. *Molecular Modelling* // *Current Opinion in Chemical Biology*.-1997.- V.1.- P.392-398.
37. Yasuhisa Kurogi. Three-Dimensional Quantitative Structure-Activity Relationships (3D-QSAR) of Antidiabetic Thiazolidinediones // *Drug. Des. Discov.* –1999. –v.16,№2 –P.109-125.
38. Лесик Р.Б., Громовик Б.П., Атаманюк Д.В., Субтельна І.Ю., Соронович І.І. Сучасні підходи до моделювання лікарських засобів // *Фармац. журн.*- № 2.- 2002.-С.33-39.
39. Ибрагимова И.Р. Электронные библиотеки в интернете // *Укр. мед. часопис*. – 2004. – №5. – С.11-15.
40. Фролов А.Н. Компьютерный мониторинг научной библиографии. Методическое пособие. Санкт-Петербург – 2002. – 46с.
41. Д. Полякова Жизнь после ВАОКСА // <http://www.apteka.ua/online/22254/>
42. Инструкция по поиску в PubMed (ПабМед) Пересмотренное и дополненное издание // электронне видання <http://nmlm.gov/hip/>.
43. Кубинь Г. В поисках новых соединений-лидеров для создания лекарств // *Рос. хим. журн.* 2006. – №2. – С.5-17.
44. Зефилов Н.С., Зефирова О.Н. Рациональный дизайн лекарств // *химия и жизнью* – 2004. - №11. – С.6-9.
45. G. Schneider, H-J Bohm Virtual screening and fast automated docking methods // *DDT*. 2002. – Vol.7, N1 – P. 64-70.
46. Magid Abou-Gharbia Discovery of Innovative Small Molecule Therapeutics // *J. Med. Chem.* 2009, 52, 2–9.

Додаткова

1. От субстанции к лекарству: Учеб. пособие / [Безуглый П. А., Болотов В. В., Гриценко И. С. и др.]; под ред. В. П. Черныха – Х.: Изд-во НФаУ: Золотые страницы, 2005. – 1244 с.
2. MacKinnon GE. Development of a personal digital assistant application for pharmacy documentation. Pharmacy Education. 2003 Jan 23;3(1).
3. Kuntz ID. Structure-based strategies for drug design and discovery. Science. 1992 Aug 21;257(5073):1078-82.
4. Strømgaard K, Krosggaard-Larsen P, Madsen U, editors. Textbook of drug design and discovery. CRC press; 2017.
5. Brooijmans N, Kuntz ID. Molecular recognition and docking algorithms. Annual review of biophysics and biomolecular structure. 2003 Jun;32(1):335-73.
6. Shoichet BK, Kuntz ID, Bodian DL. Molecular docking using shape descriptors. Journal of Computational Chemistry. 1992 Apr;13(3):380-97.

11. Обладнання, матеріально-технічне і програмне забезпечення дисципліни/ курсу

Методичне забезпечення:

- Робоча навчальна програма дисципліни;
- Мультимедійне забезпечення лекцій,
- Тези лекцій з дисципліни;
- Методичні рекомендації та розробки для викладача;
- Навчальна платформа Misa;
- Методичні вказівки до практичних занять для студентів;
- Методичні матеріали, що забезпечують самостійну роботу студентів;
- Тестові та контрольні завдання до практичних занять;
- Питання та завдання до підсумкового контролю.

12. Додаткова інформація

Відповідальна за освітній процес на кафедрі – доц. Демчук І.Л.

На кафедрі працює науковий гурток. Засідання відбуваються в ауд. №1,2.

Практичні заняття проводяться в аудиторіях кафедри за адресою вул. Пекарська, 69. Корпус фармацевтичної хімії.

Веб-сайт кафедри - e-mail Kaf_pharmchemistry@meduniv.lviv.ua

Укладач силабуса:

(Підпис)

Завідувач кафедри фармацевтичної,
органічної і біоорганічної хімії
проф. Лесик Р.Б.

(Підпис)