

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Волинський національний університет імені Лесі Українки
Факультет хімії, екології та фармації
Кафедра органічної хімії та фармації


СИЛАБУС
нормативного освітнього компонента
«КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ У ФАРМАЦІЇ»
підготовки Магістра
Галузі знань 22 – Охорона здоров'я
спеціальності 226 – Фармація, промислова фармація
Освітньо-професійної програми – Фармація

Луцьк – 2022

Силабус освітнього компонента «Комп'ютерне моделювання у фармації» підготовки магістра, галузі знань 22 – Охорона здоров'я, спеціальності 226 – Фармація, промислова фармація, форма навчання – денна, за навчальним планом, затвердженим 2020 р.

Розробник: Голота С.М., кандидат фармацевтичних наук, доцент кафедри органічної хімії та фармації

Погоджено

Гарант освітньо-професійної програми: д.фарм.н., проф.  Федоровська М.І.

Силабус освітнього компонента затверджено на засіданні кафедри органічної хімії та фармації

Протокол № 1 від 31 серпня 2022 р.

Завідувач кафедри: к.х.н., доцент  Сливка Н.Ю.

I. Опис освітнього компонента

Найменування Показників	Галузь знань, спеціальність, освітньо-професійна програма, освітній рівень	Характеристика освітнього компонента
Денна форма навчання	Галузь знань: 22 - Охорона здоров'я Спеціальність: 226 - Фармація, промислова фармація Освітньо-професійна програма: «Фармація» освітній рівень: другий (магістерський)	Нормативний
Кількість годин / кредитів: 90 / 3		Рік навчання: 3-ій
		Семестр: 5-ий
ІНДЗ: немає		Лекції: 4 год
		Лабораторні: 32 год
		Самостійна робота: 48 год
		Консультації: 6 год
Мова навчання	Українська	

II. Інформація про викладача

Прізвище, ім'я та по батькові: *Голота Сергій Миколайович*

Науковий ступінь: *кандидат фармацевтичних наук*

Вчене звання: *доцент кафедри органічної хімії та фармації*

Посада: *доцент кафедри органічної хімії та фармації*

Контактна інформація: +38 097 226 00 66 e-mail: Holota.Serhii@vnu.edu.ua

Дні занять: <http://194.44.187.20/cgi-bin/timetable.cgi?n=700>

III. Опис освітнього компонента

Анотація курсу. Освітній компонент «Комп'ютерне моделювання у фармації» належить до обов'язкових дисциплін професійної підготовки фахівців спеціальності «226 Фармація, промислова фармація», ОПП «Фармація», яка призначена для здобувачів вищої освіти денної форми навчання (5 р.н.) і вивчає теоретичні основи та елементи використання комп'ютерних технологій у фармації, ознайомлює із сучасними підходами до створення інноваційних лікарських засобів.

1. Предметом вивчення освітнього компонента «Комп'ютерне моделювання у фармації» є вивчення методів та інформаційні процеси, що передбачають використання персонального комп'ютера у розробці, створенні та дослідженні будови та властивостей лікарських засобів та біологічно-активних сполук.

2. Пререквізити. Для вивчення освітнього компонента «Комп'ютерне моделювання у фармації» необхідні базові навички користування ПК, а також знання таких дисциплін як: загальна та неорганічна хімія, органічна хімія, аналітична хімія, фізична та колоїдна хімія, фізична та колоїдна хімія, європейський стандарт комп'ютерної грамотності, інформаційні технології у фармації.

3. Постреквізити. Вивчення освітнього компонента «Комп'ютерне моделювання у фармації» сприятиме кращому засвоєнню таких дисциплін як: фармацевтична хімія, фармакотерапія з фармакокінетикою, розробка лікарських засобів, фармацевтичний менеджмент та маркетинг.

4. Мета і завдання навчальної дисципліни.

Метою вивчення освітнього компонента «Комп'ютерне моделювання у фармації» є надання необхідних знань студентам фармацевтичного факультету в галузі інноваційних технологій у фармації, пов'язаних з комп'ютеризацією для використання їх у майбутній практичній діяльності провізора.

Основні **завдання** освітнього компонента «Комп'ютерне моделювання у фармації»:

- засвоєнні основних програмних пакетів, що застосовуються у фармації;
- ознайомленні інноваційних підходів до створення ліків та їх програмного забезпечення;
- вивчення сучасних лікарських засобів, створених на основі інноваційних технологій та використанні системи Internet для професійної діяльності.

5. Результати навчання (компетентності).

Інтегральна компетентність (ІНТ): Здатність розв'язувати типові та складні спеціалізовані задачі та практичні проблеми у професійній фармацевтичній діяльності із застосуванням положень, теорій та методів фундаментальних, хімічних, технологічних, біомедичних та соціально-економічних наук; інтегрувати знання та вирішувати складні питання, формулювати судження за недостатньої або обмеженої інформації; ясно і недвозначно доносити свої висновки та знання, розумно їх обґрунтовуючи, до фахової та нефахової аудиторії.

Загальні компетентності (ЗК):

ЗК2. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК4. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу, здатність вчитися і бути сучасно навченим.

ЗК6. Знання та розуміння предметної області та розуміння професії.

ЗК9. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій.

ЗК12. Здатність проведення досліджень на відповідному рівні.

Фахові компетентності (ФК):

ФК 5. Здатність здійснювати моніторинг ефективності та безпеки застосування населенням лікарських засобів згідно даних щодо їх клініко-фармацевтичних характеристики, а також з урахуванням суб'єктивних ознак та об'єктивних клінічних, лабораторних та інструментальних критеріїв обстеження хворого.

ФК 17. Здатність організувати і здійснювати загальне і маркетингове управління асортиментною, товарно-інноваційною, ціновою, збутовою та комунікативною політиками суб'єктів фармацевтичного ринку на основі результатів маркетингових досліджень та з урахуванням ринкових процесів на національному і міжнародному ринках, управляти ризиками в системі фармацевтичного забезпечення.

Програмні результати навчання згідно з вимогами освітньої програми (ПРН):

ПРН 2. Застосовувати знання з загальних та фахових дисциплін у професійній діяльності.

ПРН 4. Демонструвати вміння самостійного пошуку, аналізу і синтезу інформації з різних джерел і використання цих результатів для рішення типових та складних спеціалізованих завдань професійної діяльності.

ПРН 7. Виконувати професійну діяльність з використанням креативних методів та підходів.

ПРН 9. Здійснювати професійну діяльність, використовуючи інформаційні технології, інформаційні бази даних, системи навігації, Internet-ресурси, програмні засоби та інші інформаційно-комунікаційні технології.

ПРН 12. Аналізувати інформацію, отриману в результаті наукових досліджень, узагальнювати, систематизувати й використовувати її у професійній діяльності.

ПРН 17. Використовувати дані клінічних, лабораторних та інструментальних досліджень для здійснення моніторингу ефективності та безпеки застосування лікарських засобів.

ПРН 29. Забезпечувати конкурентоспроможні позиції та ефективний розвиток фармацевтичних організацій на основі проведеної дослідницької роботи за усіма елементами комплексу маркетингу.

6. Структура освітнього компонента

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин				Форма контролю/ Бали	
	Усього	у тому числі				
		Лекції	Лабор.	Конс.		Сам. р.
Тема 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».	7	2	2		3	ВЛР/2 УО/2 Т/1
Тема 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.	5		2		3	ВЛР/2 УО/2 Т/1
Тема 3. Практичне використання мережі Інтернет та електронних баз даних для пошуку інформації про лікарські засоби.	5		2		3	ВЛР/2 УО/2 Т/1
Тема 4. Пошук інформації про лікарські засоби і/або біологічно-активні сполуки на етапі доклінічних/клінічних досліджень,	5		2		3	ВЛР/2 УО/2 Т/1

їх особливості, використання тощо.						
Тема 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).	5		2		3	ВЛР/2 УО/2 Т/1
Тема 6. Практичне використання програмного пакету Accelrys (ISIS) (Base, Draw) у фармації як повнофункціональної системи управління хімічними та фармацевтичними базами даних.	7		2	2	3	ВЛР/2 УО/2 Т/1
Тема 7. Оперування бібліотеками хімічних сполук. Використання хімічних редакторів для пошуку інформації у спеціалізованих базах даних.	7	2	2		3	ВЛР/2 УО/2 Т/1
Тема 8. Новітні підходи до створення інноваційних лікарських засобів. Віртуальні бібліотеки, віртуальний скринінг – принципи, підходи та алгоритми, програмні пакети для реалізації етапів	5		2		3	ВЛР/2 УО/2 Т/1
Тема 9. Сучасні підходи до дизайну нових біологічно активних сполук. Поняття про ліганд-, мішень-орієнтований, «fragment-base» дизайн, «structure-based» дизайн	5		2		3	ВЛР/2 УО/2 Т/1
Тема 10. Розрахунок молекулярних дескрипторів структури (правила Ліпінського). Можливості представлення інформації про молекулярну структуру та біологічні/фармакологічні ефекти реальних чи віртуальних сполук	5		2		3	ВЛР/2 УО/2 Т/1
Тема 11. Сучасні підходи до вивчення зв'язку структура-активність. Опрацювання методології проведення QSAR-аналізу та програмне забезпечення для їх реалізації	5		2		3	ВЛР/2 УО/2 Т/1
Тема 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	7		2	2	3	ВЛР/2 УО/2 Т/1
Тема 13. Практичне використання молекулярного моделювання	5		2		3	ВЛР/2 УО/2

(методи молекулярної механіки та напівемпіричні квантово-хімічні методи) для моделювання тривимірної структури молекул у процесі пошуку нових лікарських засобів.						T/1
Тема 14. Застосування докінгового дослідження як методу прогнозування оцінки зв'язування лігандів з біомакромолекулами, як потенційними мішенями для лікарських засобів. Кореляція з експериментальними даними.	5		2		3	ВЛР/2 УО/2 Т/1
Тема 15. Оптимізація структури сполук лідерів. Інші алгоритми та підходи віртуального скринінгу та drug design	5		2		3	ВЛР/2 УО/2 Т/1
Тема 16. Використання комп'ютерних технологій для автоматизація робочих місць у аптеках, гуртових фармацевтичних фірмах. Приклади програмного забезпечення. Функціональні вимоги. Автоматизований маркетинговий аналіз пропозиції гуртових фірм. Функціональні можливості бази даних «Лікарські засоби» (Моріон). Е-аптека, можливості та реалії.	5		2		3	ВЛР/2 УО/2 Т/1
Контрольна робота	2			2		20
Усього годин	90	4	32	6	48	100

*Форма контролю: Т – тести, ВЛР – виконання лабораторної роботи, УО – усна відповідь.

6. Тематичні плани

6.1. Тематичний план лекцій

№ за/п	Тема	К-сть год
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.	2
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.	2
Усього:		4

6.2. Тематичний план лабораторних занять

№ за/п	Тема	К-ть год
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»	2
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.	2
3.	Практичне використання мережі Інтернет та електронних баз даних для пошуку інформації про лікарські засоби	2
4.	Пошук інформації про лікарські засоби і/або біологічно-активні сполуки на етапі доклінічних/клінічних досліджень, їх особливості, використання тощо.	2
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).	2
6.	Практичне використання програмного пакету Accelrys (ISIS) (Base, Draw) у фармації як повнофункціональної системи управління хімічними та фармацевтичними базами даних	2
7.	Оперування бібліотеками хімічних сполук. Використання хімічних редакторів для пошуку інформації у спеціалізованих базах даних.	2
8.	Новітні підходи до створення інноваційних лікарських засобів. Віртуальні бібліотеки, віртуальний скринінг – принципи, підходи та алгоритми, програмні пакети для реалізації етапів	2
9.	Сучасні підходи до дизайну нових біологічно активних сполук. Поняття про ліганд-, мішень-орієнтований, «fragment-base» дизайн, «structure-based» дизайн	2
10.	Розрахунок молекулярних дескрипторів структури (правила Ліпінського). Можливості представлення інформації про молекулярну структуру та біологічні/фармакологічні ефекти реальних чи віртуальних сполук	2
11.	Сучасні підходи до вивчення зв'язку структура-активність. Опрацювання методології проведення QSAR-аналізу та програмне забезпечення для їх реалізації	2
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	2
13.	Практичне використання молекулярного моделювання (методи молекулярної механіки та напівемпіричні квантово-хімічні методи) для моделювання тривимірної структури молекул у процесі пошуку нових лікарських засобів	2
14.	Застосування докінгового дослідження як методу прогнозування оцінки зв'язування лігандів з біомакромолекулами, як потенційними мішенями для лікарських засобів. Кореляція з експериментальними даними	2
15.	Оптимізація структури сполук лідерів. Інші алгоритми та підходи віртуального скринінгу та drug design	2
16.	Використання комп'ютерних технологій для автоматизація робочих місць у аптеках, гуртових фармацевтичних фірмах. Приклади програмного забезпечення. Функціональні вимоги. Автоматизований маркетинговий аналіз пропозиції гуртових фірм. Функціональні можливості бази даних «Лікарські засоби» (Моріон). Е-аптека, можливості та реалії. Контрольна робота	2

Усього	32
---------------	-----------

6.3. Тематичний план самостійної роботи

№ за/п	Тема	К-ть год
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.	6
2.	Пошук інформації про лікарські засоби певної фармакологічної групи в мережі INTERNET за вказівкою викладача.	6
3.	Пошук і систематизація інформації з бази даних MEDLINE за темою даною викладачем.	3
4.	Комп'ютерні підходи у прогнозуванні токсичності та фармакокінетичних параметрів потенційних лікарських засобів.	6
5.	Комбінаторна хімія та високоефективний фармакологічний скринінг як роботизовані сучасні підходи до пошуку лікарських засобів.	6
6.	Поняття, класифікація та види молекулярних дескрипторів та їх використання у моделюванні залежностей «структура-активність»	6
7.	Порівняльна характеристика алгоритмів та існуючого програмного забезпечення для докінгу.	6
8.	Програмні пакети, що застосовуються для реалізації практичної діяльності провізора за кордоном	6
9.	Модель комплексного програмного продукту для забезпечення потреб у автоматизації роботи працівників за кордоном.	3
Усього:		48

IV. Політика оцінювання

Політика викладача щодо студента: студент повинен відвідувати лекції і лабораторні заняття. Пропущені без поважних причин заняття потрібно відпрацювати: підготувати конспект лекції, пройти опитування за темою лабораторного заняття, письмово оформити протокол лабораторного заняття.

Політика щодо академічної доброчесності: усі завдання студент повинен виконувати самостійно.

Політика щодо дедлайнів і перескладання: у випадку пропуску лекції без поважної причини студент готує конспект до наступного лабораторного заняття. До закінчення вивчення модуля студент повинен відпрацювати усі лабораторні заняття.

V. Підсумковий контроль

Вивчення освітнього компонента «Комп'ютерне моделювання у фармації» здійснюється впродовж одного семестру на третьому році навчання (5 семестр). За результатами поточної навчальної діяльності виставляється залік.

Семестровий залік – це форма підсумкового контролю, що полягає в оцінці засвоєння студентом навчального матеріалу з фізико-хімічного аналізу у створенні ліків на підставі результатів виконання ним усіх видів навчальних робіт, передбачених навчальною програмою. Семестровий залік виставляється за результатами поточного контролю теоретичних знань, практичних вмінь і навичок. Якщо протягом семестру студент набрав 60 і більше балів, він може отримати залік, не складаючи його.

У випадку незадовільної підсумкової оцінки (менше 60 балів) або за бажанням підвищити свій результат студент:

- може добрати бали, виконавши певний вид робіт (наприклад, здати одну із тем або перездати відповідну тему, шляхом написавши тесту, розв'язання ситуаційної задачі, усного опитування тощо);

- складає семестр залік, який включає весь навчальний матеріал освітнього компонента; при цьому він може набрати від 0 до 100 балів, де 60 балів і вище – задовільна /позитивна оцінка.

VI Розподіл балів і критерії оцінювання

1. Методи та засоби діагностики успішності

Підготовка до лабораторних занять, усні / письмові допуски до лабораторних робіт; комп'ютерне тестування; письмова контрольна робота; якість виконання й оформлення лабораторних робіт та їх захист.

2. Оцінювання всіх видів робіт студентів

Максимальна оцінка за семестр складає **100 балів**, що включає оцінювання за поточний контроль.

Лабораторні роботи оцінюються по 2 бали кожна – підготовка 0.5 бала, виконання 1 бал, захист 0.5 бала (16 робіт).

Усні опитування оцінюються по 2 бали кожне (16 опитувань).

Тести оцінюються по 1 балові кожен (16 тестувань).

Контрольна робота оцінюється у 20 балів.

Оцінювання контрольної роботи

Форма контролю, бали		Загальний бал
Тести, 20 питань	Написання розгорнутих відповідей, 5 питань	
0,25 бала за питання сумарно – 5 балів	3 бали за питання сумарно – 15 балів	20

Перелік питань до заліку:

1. Назвіть відомі Вам операційні системи та умови їх ліцензування?
2. Перерахуйте основні сервіси мережі INTERNET.
3. Що таке “194.44.178.76” та що таке “www.vnu.edu.ua”? Яка між ними різниця? Значення частин доменних імен.
4. Назвіть кириличні та англійські пошукові сервери.
5. Протоколи обміну інформацією їх призначення.
6. Ступені надійності та достовірності інформації.
7. Переваги та недоліки електронних бібліотек.
8. Системи «фільтрування» інформації.
9. Підходи до оцінки знайденої інформації.
10. Основні фармацевтичні інституції представлені в мережі Інтернет. Структура фармацевтичної галузі. Українська фармація в мережі Інтернет.
11. Що таке база даних? Які спеціалізовані бази даних фармацевтичної та медико-біологічної інформації Ви знаєте? Наукометричні бази даних.
12. Провідні світові видавництва наукової інформації.
13. Структура наукової публікації.
14. Що таке Імпакт фактор, Індекс Гірша. Як розраховуються ці показники? Де їх можна знайти? їх актуальність.
15. Доступність оригінальних наукових публікацій.
16. Характеристика патентів як джерела найновішої інформації в певній конкретній галузі (можливості використання, умови доступу до патентної інформації).
17. Можливості бази даних CocraneLibrary.
18. Основні прийоми та принципи пошуку спеціалізованої інформації.
19. Доступність та надійність фармацевтичної та медико-біологічної інформації.
20. Охарактеризуйте типи файлів, що використовуються для збереження хімічної інформації.
21. Хімічні редактори. Приклади, особливості використання.
22. Можливості баз даних оперування хімічною інформацією.
23. Які можливості оперування хімічними структурами дає програмний пакет ISIS draw?
24. З яких модулів складається програмний пакет ChemOffice та які можливості він дає?
25. Специфіка та особливості хімічних (хіміко-фармацевтичних) баз даних.
26. Призначення та функціональні можливості MERCK-Index, PubChem, PDB.
27. Особливості використання фізико-хімічних та хімічних даних при пошуку спеціалізованої

інформації.

28. Охарактеризувати можливості та призначення, умови використання: Reaxys, SciFinder.
29. Приклади хімічних баз даних (каталогів) доступних в мережі Internet.
30. Охарактеризуйте основні сучасні стратегії створення нових лікарських засобів.
31. Шлях лікарського засобу «від молекули – до препарату» (основні етапи).
32. Віртуальні бібліотеки, їх типи, види (характеристика БД ZINCTM як прикладу віртуальної бібліотеки хімічних сполук).
33. Основні етапи віртуального скринінгу.
34. Молекулярні дескриптори: визначення, класифікація, методи розрахунку.
35. Лікоподібність (“drug-like properties”) – поняття, використання.
36. Правила Ліпінського, правила Вебера.
37. Програмні пакети для розрахунку молекулярних дескрипторів (Dragon, ACD-Labs, HyperChem).
38. Ліофільність – поняття, методи встановлення, алгоритм розрахунку, використання, значення.
39. Методи представлення та оцінки біологічної активності.
40. Основні механізми дії лікарських засобів та біологічно активних сполук, поняття про молекулярні/біологічні мішені.
41. Високоєфективний скринінг (high throuput screening)
42. Фундаментальні відкриття та есенціальні твердження, що лежать в основі взаємозв’язку структура-активність.
43. Проблема вибору характеристик молекул (дескрипторів), що найбільше впливають на виявлення біологічної активності сполук при проведенні QSAR аналізу.
44. Обробка результатів та висновки QSAR аналізу.
45. Шляхи оцінки 2D-подібності (використання т.з. молекулярних або структурних відбитків - “fingerprints”, індексів Танімото).
46. Доступність, можливості, принципи функціонування програми PASS C&T.
47. Хімічні програмні пакети, розроблені <http://www.vcclab.org>.
48. Охарактеризуйте методи моделювання 3D-структури молекул, (молекулярно-механічні, напівемпіричні, ab-initio) Advanced Chemistry Development, Inc., (ACD/Labs). Їх доступність та можливості.
49. Характеристика програмних пакетів, доступ до яких забезпечує сайт Віртуальної комп’ютерної хімічної лабораторії - Virtual Computational Chemistry Laboratory
50. Функціональні можливості та вимоги до програмних продуктів, що використовуються для молекулярного моделювання.
51. Приклади програмних продуктів для молекулярного моделювання, порівняльна характеристика.
52. Молекулярний докінг як один з етапів віртуального скринінгу. Види, їх характеристика (гнучкий, жорсткий молекулярний докінг).
53. Програмне забезпечення, що використовується для молекулярного докінгу.
54. Дати визначення поняттю «афінність».
55. Характеристика програми OPENBABEL.
56. База даних білкових структур PDB.
57. Відмінність методів ліганд-орієнтованого та мішень-орієнтованого дизайну біологічно активних сполук.
58. Особливості фрагмент-орієнтованого (fragment-based) конструювання біологічно активних сполук.
59. Сполуки-хіти і сполуки-лідери, вимоги, характеристика, відмінності. Методи оптимізації сполук-лідерів.
60. Приклади сполук-лідерів. Приклади привілейованих структур.
61. Принципи побудови та функціональні вимоги до складських програм для використання в практичній фармації.
62. Поняття зведеного електронного прайс-листа, проблеми використання та стандартизації інформації (методи подолання).
63. Технічні особливості функціонування системи відшкодування вартості лікарських засобів в інших країнах (на прикладі Республіки Польщі).

64. Характеристика програмного пакету “1С Підприємство”.
65. Використання POS-терміналів та системи штрих-кодування. Специфіка фармацевтичної галузі.
66. Функції та можливості електронної аптеки, переваги, недоліки.
67. Реалії використання послуг електронної аптеки населенням.
68. Можливості використання спеціалістами, аптеками та гуртовими постачальниками продуктів та проектів українського підприємства «Моріон».

VI. Шкала оцінювання

Оцінка в балах	Лінгвістична оцінка
90–100	Зараховано
82–89	
75–81	
67–74	
60–66	
1–59	Незараховано (необхідне перескладання)

VIII. Рекомендована література та інтернет-ресурси

1. Комп’ютерний дизайн лікарських засобів: навчальний посібник / Я.І. Деяк, О.Т. Девіняк, О.В. Криванич, Е.М. Вашкеба-Бітлер, І.Ю. Стан; Ужгород, 2021. 105с.

Додаткова література

1. Туркевич М., Владзімірська О., Лесик Р. Фармацевтична хімія (стероїдні гормони, їх синтетичні замінники і гетероциклічні сполуки як лікарські засоби). Підручник. – Вінниця: Нова Книга, 2003. – 464 с.
2. Modern methods of drug discovery / A. Hillisch, R. Hilgenfeld, Ed. 2002, - Springer Basel AG-29р.
4. 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).
5. А. Кучер, Н. Гарбер, М.Баран. Світові медичні ресурси Інтернету (довідник). Київ. Здоров’я. 2003.- 336 с.
6. Орлов В.Д., Липсон В.В., Иванов В. В. Медицинская химия // Фолио.- 2005.- 464 С.
7. Державна Фармакопея України / Державне підприємство «Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів» 2-е вид. Х.: Державне підприємство «Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів», 2015. Т. 1. 1128 с., Т. 2. 724 с., Т. 3. 732 с.

Інформаційні ресурси

1. Сайт Волинського національного університету ім. Лесі Українки <http://194.44.187.60/moodle/login/index.php>
2. Міністерство охорони здоров'я України www.moz.gov.ua
3. Державний експертний центр МОЗ України www.pharma-center.kiev.ua
4. Спеціалізоване медичне інтернет-видання для лікарів, провізорів, фармацевтів, студентів медичних та фармацевтичних вузів www.morion.ua
5. Всесвітня організація охорони здоров'я www.who.int

