

МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
ВИЩІЙ ДЕРЖАВНИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД УКРАЇНИ «БУКОВИНСЬКИЙ
ДЕРЖАВНИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ»

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор з науково-педагогічної роботи
доцент _____ І.В. Геруш
« 26 » _____ 2020 р.

ДОВІДНИК ДЛЯ СТУДЕНТА
(СИЛАБУС)
з вивчення навчальної дисципліни
курс та вибором
«КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ У ФАРМАЦІЇ»

Галузь знань 22 Охорона здоров'я

Спеціальність 226 Фармація, промислова фармація

Освітній ступінь магістр

Курс навчання 3

Форма навчання денна, зочна

Кафедра медичної та фармацевтичної хімії

Схвалено на методичній нараді кафедри медичної та фармацевтичної хімії „10” червня 2020 року (протокол №16).

Завідувач кафедри _____ (М. К. Братенко)

Схвалено предметною методичною комісією з дисциплін фармацевтичного профілю „17” червня 2020 року (протокол № 6).

Голова предметної методичної комісії дисциплін фармацевтичного профілю

к.фарм.н., доцент _____ (О. В. Геруш)

Чернівці – 2020

1.ЗАГАЛЬНІ ВІДОМОСТІ ПРО НАУКОВО-ПЕДАГОГІЧНИХ ПРАЦІВНИКІВ, ЯКІ ВИКЛАДАЮТЬ НАВЧАЛЬНУ ДИСЦИПЛІНУ

Кафедра	Медичної та фармацевтичної хімії
Прізвище, ім'я, по батькові науково-педагогічних працівників, посада, науковий ступінь, вчене звання, e-mail	Ткачук Михайло Михайлович – асистент кафедри, кандидат хімічних наук tmm777@ukr.net
Веб-сторінка кафедри на офіційному веб-сайті університету	https://www.bsmu.edu.ua/medichnoyi-tafarmatsevtichnoyi-himiyi/
Веб-сайт кафедри	http://medchem.bsmu.edu.ua/
E-mail	chemistry@bsmu.edu.ua
Адреса	м. Чернівці, вул. Богомольця, 2
Контактний телефон	+38 (0372) 52-57-29

2.ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО НАВЧАЛЬНУ ДИСЦИПЛІНУ

Статус дисципліни	вибіркова
Кількість кредитів	3
Загальна кількість годин	90
Лекції	10
Практичні заняття	30
Самостійна робота	50
Вид заключного контролю	залік

3.ОПИС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ (АНОТАЦІЯ)

Предмет комп'ютерне моделювання у фармації має основним завданням розвивати науководослідницькі компетенції фахівців у області фармації. Комп'ютерне моделювання у фармації займається вивченням питань, пов'язаних з використанням математичних моделей як методу дослідження об'єктів і процесів у фармації. На сьогоднішній час, в зв'язку з швидким розвитком комп'ютерної техніки, все більше значення набуває метод дослідження об'єктів і процесів з допомогою моделей. При моделюванні немає необхідності створювати для кожного процесу спеціальні експериментальні установки; метод моделювання забезпечує простоту, оперативність і прийнятну вартість досліджень. Крім того, він дозволяє провести аналіз поведінки реальних систем в умовах, що недоступні експерименту, а саме при характеристиках, які ще не досягнуті в сучасній техніці, або практична реалізація яких утруднена чи не доцільна. Особливо ефективно моделювання доповнює знання про об'єкт або процес там, де є експериментально підтверджені закони взаємодії один з іншим його окремих елементів і потрібно дослідити поведінку системи в цілому.

4.ПОЛІТИКА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

4.1.Перелік нормативних документів:

- Положення про організацію освітнього процесу (<https://www.bsmu.edu.ua/wpcontent/uploads/2020/03/polozhennya-pro-organizacziyu-osvitnogo-proczesu-u-vdnzu-bukovinskijderzhavnij-medichnij-universitet.pdf>);
- Інструкція щодо оцінювання навчальної діяльності студентів БДМУ в умовах впровадження Європейської кредитно-трансферної системи організації навчального процесу (<https://www.bsmu.edu.ua/wp-content/uploads/2020/03/bdmu-instrukciya-shhodo-oczinuyvannya-%D1%94kts-2014-3.pdf>);
- Положення про порядок відпрацювання пропущених та незарахованих занять (<https://www.bsmu.edu.ua/wp-content/uploads/2019/12/reworks.pdf>);

- Положення про апеляцію результатів підсумкового контролю знань здобувачів вищої освіти (<https://www.bsmu.edu.ua/wp-content/uploads/2020/07/polozhennya-proapelyacziyu-rezultativ-pidsumkovogo-kontrolyu-znan.pdf>);
- Кодекс академічної доброчесності (https://www.bsmu.edu.ua/wp-content/uploads/2019/12/kodeks_academic_faith.pdf);
- Морально-етичний кодекс студентів (https://www.bsmu.edu.ua/wp-content/uploads/2019/12/ethics_code.docx);
- Положення про запобігання та виявлення академічного плагіату (<https://www.bsmu.edu.ua/wp-content/uploads/2019/12/antiplagiat-1.pdf>);
- Положення про порядок та умови обрання студентами вибіркових дисциплін (https://www.bsmu.edu.ua/wp-content/uploads/2020/04/nakaz_polozhennyz_vybirkovi_dyscypliny_2020.pdf);
- Правила внутрішнього трудового розпорядку Вищого державного навчального закладу України «Буковинський державний медичний університет» (<https://www.bsmu.edu.ua/wp-content/uploads/2020/03/17.1-bdmu-kolektivnij-dogovirdodatok.doc>).

4.2. Політика щодо дотримання принципів академічної доброчесності здобувачів вищої освіти:

- самостійне виконання навчальних завдань поточного та підсумкового контролів без використання зовнішніх джерел інформації;
- списування під час контролю знань заборонені;
- самостійне виконання індивідуальних завдань та коректне оформлення посилань на джерела інформації у разі запозичення ідей, тверджень, відомостей.

4.3. Політика щодо дотримання принципів та норм етики та деонтології здобувачами вищої освіти:

- дії у професійних і навчальних ситуаціях із позицій академічної доброчесності та професійної етики та деонтології;
- дотримання правил внутрішнього розпорядку університету, бути толерантними, доброзичливими та виваженими у спілкуванні зі студентами та викладачами, медичним персоналом закладів охорони здоров'я;
- усвідомлення значущості прикладів людської поведінки відповідно до норм академічної доброчесності та медичної етики.

4.4. Політика щодо відвідування занять здобувачами вищої освіти:

- присутність на всіх навчальних заняттях (лекціях, практичних (семінарських) заняттях, підсумковому модульному контролі) є обов'язковою з метою поточного та підсумкового оцінювання знань (окрім випадків з поважних причин).

4.5. Політика дедлайну та відпрацювання пропущених або незарахованих занять здобувачами вищої освіти:

- відпрацювання пропущених занять відбувається згідно з графіком відпрацювання пропущених або незарахованих занять та консультацій.

5. ПЕРЕКВІЗИТИ І ПОСТРЕКВІЗИТИ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ (МІЖДИСЦИПЛІНАРНІ ЗВ'ЯЗКИ)

Перелік навчальних дисциплін, на яких базується вивчення навчальної дисципліни	Перелік навчальних дисциплін, для яких закладається основа в результаті вивчення навчальної дисципліни
Загальна та неорганічна хімія	Аналітична хімія
Органічна хімія	Фармацевтична хімія
Вища математика	Біологічна хімія

	Технологія ліків
	Токсикологічна хімія

6. МЕТА ТА ЗАВДАННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ:

6.1. Мета вивчення дисципліни надати майбутньому фахівцю можливість оволодіти знаннями, навичками та вміннями щодо використання технічних можливостей комп'ютерної техніки і програмного забезпечення для дослідницької та наукової діяльності фармацевта.

6.2. Основними завданнями вивчення курсу Формування міцних фундаментальних знань та опанування методик використання комп'ютерної техніки для опрацювання експериментальних результатів сучасних складних методів фізико-хімічного аналізу (ЯМР, ІЧ, електронної, ЕПР і мас-спектроскопії), для основ математичного моделювання біологічних, хімічних, хіміко-технологічних і фармакокінетичних процесів.

7. КОМПЕТЕНТНОСТІ, ФОРМУВАННЮ ЯКИХ СПРИЯЄ НАВЧАЛЬНА ДИСЦИПЛІНА:

7.1. інтегральні:

здатність розв'язувати типові та ускладнені задачі, практичні проблеми у професійній фармацевтичній діяльності із застосуванням положень, теоретичного матеріалу та методів комп'ютерного моделювання, що передбачає проведення експериментальних (аналітичних, фізико-хімічних тощо) досліджень та характеризується комплексністю та невизначеністю умов та вимог.

7.2. загальні:

ЗК 2. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК 4. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу, вчитися і бути сучасно навченим

ЗК 10. Здатність до вибору стратегії спілкування, здатність працювати в команді та з експертами з інших галузей знань/видів економічної діяльності.

ЗК 11. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт.

ЗК 12. Здатність проведення досліджень на відповідному рівні.

7.3. спеціальні (фахові, предметні):

ФК 12. Здатність організувати, забезпечувати і проводити аналіз лікарських засобів та лікарської рослинної сировини в аптечних закладах і контрольно-аналітичних лабораторіях фармацевтичних підприємств відповідно до вимог Державної фармакопеї та інших нормативно-правових актів

ФК 13. Здатність організувати та здійснювати контроль якості лікарських засобів у відповідності з вимогами Державної фармакопеї України та належних практик, визначати способи відбору проб для контролю лікарських засобів відповідно до діючих вимог та проводити їх сертифікацію, запобігати розповсюдженню фальсифікованих лікарських засобів

ФК 14. Здатність здійснювати розробку методик контролю якості лікарських засобів, фармацевтичних субстанцій, лікарської рослинної сировини і допоміжних речовин з використанням фізичних, фізико-хімічних та хімічних методів контролю

ФК 15. Здатність визначати лікарські засоби та їх метаболіти у біологічних рідинах та тканинах організму, проводити хіміко-токсикологічні дослідження з метою діагностики гострих отруєнь, наркотичного та алкогольних сп'янінь

8. РЕЗУЛЬТАТИ НАВЧАННЯ.

В результаті вивчення навчальної дисципліни здобувач повинен:

8.1. Знати як:

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

ПРЗ 4 Використовувати результати самостійного пошуку, аналізу та синтезу інформації з різних джерел для рішення типових завдань професійної діяльності.

ПРЗ 10 Дотримуватися норм спілкування у професійній взаємодії з колегами, керівництвом, споживачами, ефективно працювати у команді.

ПРЗ 11. Використовувати методи оцінювання показників якості діяльності; виявляти резерви підвищення ефективності праці.

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

Методи опрацювання експериментальних даних фізико-хімічного аналізу;

Програмне забезпечення сучасних складні і інформативних методів аналізу (ЯМР спектроскопії, мас-спектроскопії, хроматографічних та оптичних методів аналізу)

Основи математичного моделювання процесів і явищ у фармації, інтегровані комп'ютерні засоби для використання на різних етапах фармвиробництва, науковій діяльності;

Основні можливості програмних засобів для аналізу лікарських препаратів; основні обчислювальні методи вирішення математичних задач у фармації, хімії та біології.

Основні принципи методів встановлення будови лікарських сполук (ВГЧ, ГЧ та УФ спектроскопії, спектроскопії ЯМР, мас-спектроскопії, хроматографії, хроматомаспектроскопії);

8.2. Уміти:

ПРФ 12. Застосовувати у професійній діяльності сучасні методи контролю якості лікарських засобів та лікарської рослинної сировини.

ПРФ 13. Здійснювати всі види контролю якості лікарських засобів.

ПРФ 14. Визначати основні органолептичні, фізико-хімічні, хімічні та фармако-технологічні показники лікарських засобів, обґрунтовувати та обирати методи для стандартизації, здійснювати статистичну обробку результатів згідно з вимогами Державної фармакопеї України.

ПРФ 15. Обирати біологічні об'єкти аналізу, здійснювати визначення ксенобіотиків та їх метаболітів у біологічних середовищах та давати оцінку отриманим результатам з урахуванням розподілу токсинів в організмі

Здійснювати статистичну обробку результатів експерименту, згладжувати та інтерполювати експериментальні дані у фармацевтичному аналізі;

Використовувати методи математичного планування експерименту для вирішення задач у фармації;

Використовувати засоби комп'ютерної техніки для дослідження біологічних, хімічних і фармакокінетичних процесів; на основі їх здійснювати інтерпретацію спектрів ЯМР, ГЧ, електронної, ЕПР і маспектроскопії;

Використовувати засоби комп'ютерного прогнозування для визначення основних органолептичних, фізико-хімічних, хімічних та фармако-технологічних показників лікарських засобів на основі їх будови;

Здійснювати автоматизований скринінг для вибору умов, сорбенту, розчинників тощо в тому числі автоматизації вибору для прискорення очистки лікарських засобів.

8.3. Демонструвати:

Базові навички автоматизованої роботи з найважливішими статистичними тестами для клінічних досліджень, досліджень у фармації та медичних досліджень.

Здатність прогнозувати переваги та недоліки лікарських засобів різних фармакологічних груп з урахуванням їхніх біофармацевтичних, фармакокінетичних та фармакодинамічних особливостей;

9. ІНФОРМАЦІЙНИЙ ОБСЯГ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

На вивчення навчальної дисципліни відводиться 90 годин (3 кредити ЄКТС) – 1 модуль: «Комп'ютерні платформи для різних задач фармації», який складається з трьох змістових модулів: «Опрацювання експериментальних даних в Mathcad», «Комп'ютерні платформи для різних задач фармацевтичної промисловості», «Розрахунок фізикохімічних констант і параметрів лікарських засобів. Прогнозування їх біологічної активності».

9.1. Конкретні цілі:

змістовий модуль 1. Опрацювання експериментальних даних в Mathcad:

Здійснювати статистичну обробку результатів експерименту, згладжувати та інтерполювати експериментальні дані у фармацевтичному аналізі;

змістовий модуль 2. Комп'ютерні платформи для різних задач фармацевтичної промисловості:

Здійснювати інтерпретацію спектрів ІЧ, електронної та ЕПР та ЯМР -спектроскопії на основі платформи ACD-Labs. Автоматичне розпізнавання сполук за результатами даних методів компютерними засобами. Скринінг та оптимізація хроматографічних методів.

змістовий модуль 3. Розрахунок фізико-хімічних констант і параметрів лікарських засобів. Прогнозування їх біологічної активності:

Використовувати засоби комп'ютерного прогнозування для визначення основних органолептичних, фізико-хімічних, хімічних та фармако-технологічних показників лікарських засобів на основі їх будови;

9.2.

Модуль 1. Комп'ютерні платформи для різних задач фармації

Змістовий модуль 1. Опрацювання експериментальних даних в Mathcad.

Тема 1. Опрацювання експериментальних даних в Mathcad.

Визначення

- виборочного середнього значення, дисперсії, середньоквадратичного відхилення, коефіцієнтів коваріації та кореляції;

- інтервальної оцінки дисперсії (довірчого інтервалу);

- перевірка статистичних гіпотез на прикладі задач з фізико-хімічного аналізу аналітичної, фармацевтичної, фізико-колоїдної хімії та хімічної метрології.

Тема 2. Створення та аналіз лінійних рівноважних, стаціонарних та статичних моделей в Mathcad:

- в аналітичній хімії на прикладі розрахунків іонних хімічних рівноваг, в тому числі рН розчину, спряжених реакцій комплексоутворення, осадження, окисно-відновних реакцій тощо.

- в фізичній та колоїдній хімії на прикладі розрахунків реакцій, що відбуваються в газовій фазі, стаціонарного стану хімічних та електрохімічних систем, електричних схем тощо.

Розв'язок лінійних моделей з допомогою чисельних та символічних методів Mathcad.

Тема 3. Створення та аналіз лінійних рівноважних, стаціонарних та статичних моделей в Mathcad: -хімічних та технологічних процесів на прикладі хімічної або електрохімічної кінетики і взагалі макрокінетики (супуності хімічних, фізичних та фізикохімічних процесів).

Розв'язок звичайних диференціальних рівнянь, крайових задач та диференціальних рівнянь в частинних похідних засобами Matcad.

Змістовий модуль 2. Комп'ютерні платформи для різних задач фармацевтичної промисловості

Тема 1. Використання QbD в хроматографії для фармацевтичних задач на основі платформи ACD/Labs. Підвищення надійності методів рідинної хроматографії, розробка надійного методу та його перевірка. Використання системного вивчення змінних перед експериментом для оптимізації діапазонів кожної змінної. Створення ефективного хроматографічного метода з високою роздільною здатністю.

Тема 2. Автоматичне розпізнавання сполук в рідинній хроматографії, маспектроскопії, УФ-спектроскопії програмними засобами ACD/Labs. Опрацювання даних РХ/МС, УФ-спектроскопії та іншої доступної аналітичної інформації в межах однієї програми для ідентифікації сполуки в режимі реального часу.

Тема 3. Автоматичне розпізнавання даних ЯМР-спектроскопії з допомогою системи ACD / Labs Automated Structure Verification (ASV). Автоматизація процесу оцінки відповідності між пропонованою структурою і експериментальними даними для автоматизації простих випадків 1D, так і 2D спектрів ^1H - ^{13}C HSQC ЯМР.

Тема 4. Ідентифікація метаболітів з допомогою MetaSense. Автоматизація прогнозування і ідентифікації метаболітів по даних РХ/МС, УФ-спектроскопії та ізотопного сканування. Створення карт і звітів по біотрансформації. Практичне значення у створенні ліків.

Тема 5. Оптимізація для попередніх досліджень на основі ACD-Labs. Оптимізація доклінічної розробки рецептур, швидке визначення сольових форм та поліморфів. Обмін плануваннями з допомогою баз. Практичне значення у створенні ліків.

Тема 6. Скринінг ефективних хроматографічних методів з допомогою ACD / Labs Chromatographic Methods. Оцінка колективних методів на основі хроматографічних даних з різних інструментів. Привязка фізико-хімічних властивостей на основі структури з хроматографічними результатами. Межі застосування методу. Практичне значення у створенні ліків.

Змістовий модуль 3. Розрахунок фізико-хімічних констант і параметрів лікарських засобів. Прогнозування їх біологічної активності.

Тема 1. Розрахунок фізико-хімічних констант лікарських препаратів в ACD-Labs 3D-графіка. Моделювання просторової будови молекул. Розрахунок фізико-хімічних констант лікарських препаратів (температури кипіння, показника константи кислотності рKa, теплоти випаровування, розчинності).

Тема 2. Основи комп'ютерного прогнозування біологічної активності органічних молекул в програмі PASS. Сучасні напрямки пошуку нових лікарських препаратів. Основні етапи відбору і аналізу потенційних біологічно активних сполук. Методи комп'ютерного моделювання лікарських препаратів (*ComputerAidedDrugDesign, CADD*). Методи, що ґрунтуються на аналізі взаємозв'язку "структура-активність" (*Structure-ActivityRelationships = SAR; QuantitativeStructure-ActivityRelationships = QSAR*). Прикладні програми для аналізу біологічної активності лікарських препаратів. Програма PASS, порядок роботи. Визначення параметрів відбору. Аналіз даних лікарських препаратів за встановленими параметрами. Збереження і перегляд результатів відбору.

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин											
	денна форма						заочна форма					
	Усього	у тому числі					Усього	у тому числі				
		Аудиторні			С.р.	Інд.		Аудиторні			С.р.	Інд.
Л		П	С	Л				П	С			
1	2	3	4	5	6	7						
Модуль 1. Комп'ютерні платформи для різних задач фармації												
Змістовий модуль 1. Опрацювання експериментальних даних в Mathcad.												
Тема 1. Опрацювання експериментальних даних в Mathcad.	8	2	2		4		8		2		6	

Тема 2. Створення та аналіз лінійних рівноважних, стаціонарних та статичних моделей в Mathcad:	10	2	4		4		6				6	
Тема 3. Створення та аналіз лінійних рівноважних, стаціонарних та статичних моделей в Mathcad:	10	2	4		4		6				6	
Разом за змістовим модулем 1	28	6	10		12		20		2		18	
Змістовий модуль 2. Комп'ютерні платформи для різних задач фармацевтичної промисловості												
Тема 1. Використання QbD в хроматографії для фармацевтичних задач на основі платформи ACD/Labs.	8	2	2		4		6				6	
Тема 2. Автоматичне розпізнання сполук в рідинній хроматографії, мас-спектроскопії, УФспектроскопії програмними засобами ACD/Labs.	6		2		4		6				6	
Тема 3. Автоматичне розпізнавання даних ЯМР-спектроскопії з допомогою системи ACD / Labs Automated Structure Verification (ASV)	6		2		4		6				6	
Тема 4. Ідентифікація метаболітів з допомогою MetaSense.	6		2		4		6				6	
Тема 5. Оптимізація для попередніх досліджень на основі ACD-Labs.	6		2		4		6				6	
Тема 6. Скринінг ефективних хроматографічних методів з допомогою ACD / Labs Chromatographic Methods.	6		2		4		6				6	
Разом за змістовим модулем 2	38	2	12		24		36				36	
Змістовий модуль 3. Розрахунок фізико-хімічних констант і параметрів лікарських засобів. Прогнозування їх біологічної активності.												

Тема 1. Розрахунок фізико-хімічних констант лікарських препаратів в ACD-Labs	12	2	4		7		10	2	2		6	
Тема 2. Основи комп'ютерного прогнозування біологічної активності органічних молекул в програмі PASS.	12		4		7		8		2		6	
Разом за змістовим модулем 3	24	2	8		14		18	2	4		12	
Індивідуальна робота (за наявності)												
Підсумковий модульний контроль							16		2		14	
УСЬОГО ГОДИН	90	10	30		50		90	2	8		80	

10. ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ

ДЕННА ФОРМА		
№ п/п	Тема	К-сть годин
1.	Опрацювання експериментальних даних в Mathcad.	2
2.	Створення та аналіз лінійних рівноважних, стаціонарних та статичних моделей в Mathcad:	2
3.	Створення та аналіз лінійних рівноважних, стаціонарних та статичних моделей в Mathcad:	2
4.	Комп'ютерні платформи для різних задач фармацевтичної промисловості	2
5.	Розрахунок фізико-хімічних констант і параметрів лікарських засобів. Прогнозування їх біологічної активності.	2
	Разом	10
ЗАОЧНА ФОРМА		
№ п/п	Тема	К-сть годин
1.	Теоретичні аспекти комп'ютерного прогнозування біологічної дії лікарських засобів та розрахунку їх фізико-хімічних характеристик.	2
	Разом	2

11. ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ПРАКТИЧНИХ (СЕМІНАРСЬКИХ) ЗАНЯТЬ

ДЕННА ФОРМА		
№ п/п	Тема	К-сть годин
1	Опрацювання експериментальних даних в Mathcad.	2

2	Створення та аналіз лінійних рівноважних, стаціонарних та статичних моделей в Mathcad:	4
3	Створення та аналіз лінійних рівноважних, стаціонарних та статичних моделей в Mathcad:	4
4	Використання QbD в хроматографії для фармацевтичних задач на основі платформи ACD/Labs.	2
5	Автоматичне розпізнання сполук в рідинній хроматографії, маспектроскопії, УФ-спектроскопії програмними засобами ACD/Labs.	2
6	Автоматичне розпізнання даних ЯМР-спектроскопії з допомогою системи ACD / Labs Automated Structure Verification (ASV)	2
7	Ідентифікація метаболітів з допомогою MetaSense.	2
8	Оптимізація для попередніх досліджень на основі ACD-Labs.	2
9	Скринінг ефективних хроматографічних методів з допомогою ACD / Labs Chromatographic Methods.	2
10	Розрахунок фізико-хімічних констант лікарських препаратів в ACDLabs	4
11	Основи комп'ютерного прогнозування біологічної активності органічних молекул в програмі PASS.	4
Разом		30

ЗАОЧНА ФОРМА

	№ Тема п/п	К-сть годин
I семестр		
1	Опрацювання експериментальних даних в Mathcad.	2
2	Розрахунок фізико-хімічних констант лікарських препаратів в ACDLabs	2
3	Основи комп'ютерного прогнозування біологічної активності органічних молекул в програмі PASS.	2
4	Підсумковий модульний контроль.	2
Разом		8

12. ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН САМОСТІЙНОЇ РОБОТИ

ДЕННА ФОРМА		
№ п/п	Тема	К-сть годин
1	Опрацювання експериментальних даних в Mathcad.	4
2	Створення та аналіз лінійних рівноважних, стаціонарних та статичних моделей в Mathcad:	4
3	Створення та аналіз лінійних рівноважних, стаціонарних та статичних моделей в Mathcad:	4
4	Використання QbD в хроматографії для фармацевтичних задач на основі платформи ACD/Labs.	4
5	Автоматичне розпізнання сполук в рідинній хроматографії, маспектроскопії, УФ-спектроскопії програмними засобами ACD/Labs.	4
6	Автоматичне розпізнання даних ЯМР-спектроскопії з допомогою системи ACD / Labs Automated Structure Verification (ASV)	4
7	Ідентифікація метаболітів з допомогою MetaSense.	4
8	Оптимізація для попередніх досліджень на основі ACD-Labs.	4

9	Скринінг ефективних хроматографічних методів з допомогою ACD / Labs Chromatographic Methods.	4
10	Розрахунок фізико-хімічних констант лікарських препаратів в ACDLabs	7
11	Основи комп'ютерного прогнозування біологічної активності органічних молекул в програмі PASS.	7
Разом		50
ЗАОЧНА ФОРМА		
№ п/п	Тема	К-сть годин
1	Опрацювання експериментальних даних в Mathcad.	6
2	Створення та аналіз лінійних рівноважних, стаціонарних та статичних моделей в Mathcad:	6
3	Створення та аналіз лінійних рівноважних, стаціонарних та статичних моделей в Mathcad:	6
4	Використання QbD в хроматографії для фармацевтичних задач на основі платформи ACD/Labs.	6
5	Автоматичне розпізнання сполук в рідинній хроматографії, маспектроскопії, УФ-спектроскопії програмними засобами ACD/Labs.	6
6	Автоматичне розпізнання даних ЯМР-спектроскопії з допомогою системи ACD / Labs Automated Structure Verification (ASV)	6
7	Ідентифікація метаболітів з допомогою MetaSense.	6
8	Оптимізація для попередніх досліджень на основі ACD-Labs.	6
9	Скринінг ефективних хроматографічних методів з допомогою ACD / Labs Chromatographic Methods.	6
10	Розрахунок фізико-хімічних констант лікарських препаратів в ACDLabs	6
11	Основи комп'ютерного прогнозування біологічної активності органічних молекул в програмі PASS.	6
12	Підсумковий модульний контроль.	14
Разом		80

13. ПЕРЕЛІК ІНДИВІДУАЛЬНИХ ЗАВДАНЬ (не передбачено)

14. ПЕРЕЛІК ТЕОРЕТИЧНИХ ПИТАНЬ ДО ПІДСУМКОВОГО МОДУЛЬНОГО КОНТРОЛЮ

І. Перелік теоретичних питань до підсумкового модульного контролю

1. Використання системи Matcad в якості інженерного калькулятора.
2. Символьна алгебра: спрощення виразів, розклад на множники, розклад виразів, приведення подібних доданків, обчислення кінечних або безкінечних сум та добутоків;
3. Матрична алгебра.
4. Математичний аналіз: символічне диференціювання, інтегрування, розкладання в ряди, розв'язок рівнянь.
5. Інтегральні перетворення: Фур'є, Лаплаза, Z-перетворення.
6. Чисельні методи в Matcad: Інтегрування і диференціювання.
7. Чисельні методи в Matcad: алгебраїчні рівняння і оптимізація. Матричні обчислення. Спеціальні функції.
8. Чисельні методи в Matcad: звичайні диференціальні рівняння.

9. Чисельні методи в Matcad: крайові задачі.
10. Чисельні методи в Matcad: диференціальні рівняння в частинних похідних.
11. Математична статистика: нормальний (Гаусовий) та інші статистичні розподіли випадкових величин. Статистичні характеристики: побудова гістограм, визначення середнього значення і дисперсії, коваріації та кореляції, коефіцієнтів асиметрії та ексцесу та ін. Приклади інтервальної оцінки дисперсії та перевірки статистичних гіпотез.
12. Опрацювання даних: інтерполяція, регресія, згладжування і фільтрація, інтегральні перетворення.
13. Метод найменших квадратів для згладжування кривих: лінійна, поліноміальна регресія, регресія загального та спеціального вигляду.
14. Створення графіків: двохмірних та трьохмірних, їх форматування, трасіровка, масштабування. Створення анімації. Ввід-вивід у зовнішні текстові, графічні або звукові файли.
15. Суть модельного вивчення об'єктів. Модель як форма наукового пізнання.
16. Основи комп'ютерного прогнозування біологічної активності органічних молекул в програмі PASS.
17. Сучасні напрямки пошуку нових лікарських препаратів. Основні етапи відбору і аналізу потенційних біологічно активних сполук. Методи комп'ютерного моделювання лікарських препаратів (Computer Aided Drug Design, CADD). Методи, що ґрунтуються на аналізі взаємозв'язку "структура-активність" (Structure-Activity Relationships = SAR; Quantitative Structure-Activity Relationships = QSAR).

15. ПЕРЕЛІК ПРАКТИЧНИХ ЗАВДАНЬ ТА РОБІТ ДО ПІДСУМКОВОГО МОДУЛЬНОГО КОНТРОЛЮ

Практичні завдання і задачі до підсумкового модульного контролю

1. Перевід графічно заданої функції (результатів експерименту) у табличну на прикладі вольт амперних, полярографічних, потенціометричних кривих. Зворотнє представлення табличної функції у вигляді графіку засобами Matcad.
2. Лінійна, кубічна, поліноміальна сплай-інтерполяція та апроксимація на прикладі задач з фізико-хімічного аналізу та лабораторних робіт з аналітичної, фармацевтичної, фізико-колоїдної хімії.
3. Застосування згладжування кривих у фізико-хімічному аналізі (полярометрія, рефрактометрія, фотоколориметрія, потенціометрія та ін) та при обробці результатів практичних робіт з аналітичної, фармацевтичної, фізико-колоїдної хімії та хімічної метрології.
4. Визначення виборочного середнього значення, дисперсії, середньоквадратичного відхилення, коефіцієнтів коваріації та кореляції на прикладі задач з фізико-хімічного аналізу аналітичної, фармацевтичної, фізико-колоїдної хімії та хімічної метрології.
5. Визначення інтервальної оцінки дисперсії (довірчого інтервалу) на прикладі задач з фізико-хімічного аналізу аналітичної, фармацевтичної, фізико-колоїдної хімії та хімічної метрології;
6. Перевірка статистичних гіпотез на прикладі задач з фізико-хімічного аналізу аналітичної, фармацевтичної, фізико-колоїдної хімії та хімічної метрології.
7. Створення та аналіз лінійних рівноважних, стаціонарних та статичних моделей: в аналітичній хімії на прикладі розрахунків іонних хімічних рівноваг, в тому числі рН розчину, спряжених реакцій комплексоутворення, осадження, окисно-відновних

реакцій тощо. Розв'язок лінійних моделей з допомогою чисельних та символічних методів Mathcad.

8. Створення та аналіз лінійних рівноважних, стаціонарних та статичних моделей: в фізичній та колоїдній хімії на прикладі розрахунків реакцій, що відбуваються в газовій фазі, стаціонарного стану хімічних та електрохімічних систем, електричних схем тощо. Розв'язок лінійних моделей з допомогою чисельних та символічних методів Mathcad.
9. Створення та аналіз динамічних моделей хімічних та технологічних процесів на прикладі хімічної або електрохімічної кінетики і взагалі макрокінетики (сукупності хімічних, фізичних та фізико-хімічних процесів).
10. Розв'язок звичайних диференціальних рівнянь, крайових задач та диференціальних рівнянь в частинних похідних засобами Matcad на прикладі хімічної або електрохімічної кінетики і взагалі макрокінетики (сукупності хімічних, фізичних та фізико-хімічних процесів).
11. Розрахунок фізико-хімічних констант і параметрів лікарських засобів. Прогнозування їх біологічної активності. Робота в програмі ACD-Labs.
12. 3D-графіка. Моделювання просторової будови молекул. Програми утворення назв органічних молекул згідно номенклатури IUPAC. Розрахунок фізико-хімічних констант лікарських препаратів (температури кипіння, показника константи кислотності pK_a , теплоти випаровування, розчинності).
13. Розрахунок ЯМР1H спектрів з допомогою HNMR DB. Моделювання ЯМР13C спектрів з допомогою CNMR DB. Моделювання ЯМР35P, ЯМР19F спектрів з допомогою XNMR DB.
14. Прикладні програми для аналізу біологічної активності лікарських препаратів. Програма PASS, порядок роботи. Визначення параметрів відбору. Аналіз даних лікарських препаратів за встановленими параметрами. Збереження і перегляд результатів відбору.

16. МЕТОДИ ТА ФОРМИ ПРОВЕДЕННЯ КОНТРОЛЮ

Методи контролю

При оцінюванні знань здобувачів вищої освіти надається перевага стандартизованим методам контролю: письмовим роботам, тестуванню усному, опитуванню письмовому та комп'ютерному; контролю практичних навичок.

Оцінка за модуль визначається як сума оцінок поточної навчальної діяльності та оцінки підсумкового модульного контролю. Поточний контроль здійснюється на основі здобутих знань із дисципліни, самостійної роботи, практичних навичок та умінь. **Форми поточного контролю з:**

-теоретичних знань: письмові роботи, хімічні диктанти, співбесіда, індивідуальне опитування, тестові завдання, комп'ютерне тестування;

практичних навичок та умінь: самостійне виконання хімічних дослідів та умінь оформлювати спостереження і робити висновки; умінь самостійно виконувати окремі операції; написання схем хімічних реакцій та перетворень; *самостійної роботи:* письмове виконання завдань з позааудиторної та аудиторної роботи.

Форма підсумкового контролю

Підсумковий контроль здійснюється на основі теоретичних знань, практичних навичок та умінь, які здобувач вищої освіти отримав після завершення теоретично-практичного вивчення відповідних модулів.

17. ОЦІНЮВАННЯ РІВНЯ ПІДГОТОВКИ СТУДЕНТА З ДИСЦИПЛІНИ

Нарахування та розподіл балів, які студенти отримують під час вивчення дисципліни «фізико-хімічний аналіз у створенні ліків» визначається «Положенням про організацію освітнього процесу» Вищого державного навчального закладу України «Буковинський державний медичний університет».

Оцінка за залік (денна форма навчання) визначається як сума балів поточної навчальної діяльності та балів самостійної роботи студента.

Розподіл балів, які отримують студенти з курсу «Комп'ютерне моделювання у фармації» (денна форма навчання)

Кількість навчальних годин/кількість кредитів ECTS	Кількість змістових модулів, їх номери	Кількість практичних занять	Конвертація у бали традиційних оцінок					Мінімальна кількість балів*
			Традиційні оцінки				Бали за виконання індивідуального завдання	
			"5"	"4"	"3"	"2"		
90/3,0	4 (№№ 1-4)	15	12	10	8	0	20	120

Максимальна кількість балів за поточну навчальну діяльність студента – $15 \cdot 12 = 180$ балів.

Максимальна кількість балів, яку студент може набрати при вивченні кожного модулю, становить 200, в тому числі за поточну навчальну діяльність – 180 балів (90%), за результатами самостійної роботи – 20 балів (10%).

Мінімальна кількість балів, яку студент може набрати при вивченні даного залікового кредиту складає $15 \cdot 8 = 120$ балів.

14.2. Оцінка за залік (заочна форма навчання) визначається як сума балів поточної навчальної діяльності.

Розподіл балів, які отримують студенти з курсу «Комп'ютерне моделювання у фармації» (заочна форма навчання)

Номер модуля, кільк. навч. год./кредитів ECTS	Кількість змістових модулів	Кількість практичних занять	Конвертація у бали традиційних оцінок				КР	Мінім. кількість балів
			Традиційні оцінки					
			„5”	„4”	„3”	„2”		
Модуль 1, 90 (3)	4	4	50	40	30	0	120	

Максимальна кількість балів, яку може набрати студент при вивченні модулю, дорівнює 200 балам, вираховується шляхом множення кількості балів, що відповідають оцінці “5”, на кількість оцінюваних тем.

$50 \text{ балів} \times 4 \text{ ПЗ} = 200 \text{ балів};$

Мінімальна кількість балів з якою студент допускається до кредитних модулів, вираховується шляхом множення кількості балів, що відповідають оцінці "3", на кількість оцінюваних тем.

30 балів x 4 ПЗ = 120 балів.

Оцінка з дисципліни виставляється лише студентам, яким зараховано усі практичні заняття.

Оцінка з дисципліни для студентів, які успішно виконали програму з дисципліни, конвертується кафедрою у традиційну чотирибальну шкалу за абсолютними критеріями, які наведено нижче у таблиці.

Оцінка за 200-бальною шкалою	Оцінка за 4-ри бальною шкалою
Від 180 до 200	"5"
Від 150 до 179	"4"
Від мінімальної кількості, яку повинен набрати студент до 149	"3"
Нижче мінімальної кількості балів, яку повинен набрати студент	"2"

Студенти, які навчаються на одному факультеті, курсі, за однією спеціальністю, на основі кількості балів, набраних з дисципліни, ранжуються за шкалою ECTS таким чином:

Оцінка ECTS	Статистичний показник
«А»	Найкращі 10 % студентів
«В»	Наступні 25 % студентів
«С»	Наступні 30 % студентів
«D»	Наступні 25 % студентів
«E»	Останні 10 % студентів

Ранжування з присвоєнням оцінок «А», «В», «С», «D», «E» проводиться деканатами для студентів відповідного курсу та факультету, які навчаються за однією спеціальністю і **успішно** завершили вивчення дисципліни.

Оцінка ECTS у традиційну чотирибальну шкалу НЕ конвертується, оскільки шкала ECTS та чотирибальна шкала є незалежними.

200-бальна та чотирибальна шкали характеризують фактичну успішність кожного студента із засвоєння навчальної дисципліни. Шкала ECTS є відносною, порівняльною, рейтинговою, яка встановлює належність студента до групи кращих чи гірших серед референтної групи однокурсників (факультет, спеціальність). Тому оцінка «А» за шкалою ECTS не може дорівнювати оцінці «відмінно», а оцінка «В» - оцінці «добре» тощо. Як правило, при конвертації з багатобальної шкали межі оцінок «А», «В», «С», «D», «E» за шкалою ECTS не співпадають з межами оцінок «5», «4», «3» за традиційною шкалою.

18. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

19.1. Базова

1. Комп'ютерне моделювання у фармації: Навч. посіб. для мед. ВНЗ IV р.а. — 2-е вид., випр. Рекомендовано МОЗ / Булах І.Є. та ін. — К., 2017. — 208 с., тв. пал.
2. Комп'ютерне моделювання в біології / Упорядники О.В. Оглобля, М.С. Мірошніченко, С.О. Костерін. — К.: Видавничий центр «Азбука», 2012. — 120 с.

19.2. Допоміжна

1. Булах І.Є., Лях Ю.Є., Марценюк В.П., Хаїмзон І.І. Медична інформатика. Підручник для студентів II курсу медичних спеціальностей. Тернопіль, ТДМУ, «Укрмедкнига», 2008. 316 с.
2. Інформаційні технології у фармації: підручник. / І.Є. Булах, Л. П. Войтенко, Л.О. Кухар, М. Р. Мруга, І.М. Шило; За ред. Булах І.Є. К. : Медицина, 2008. 224 с.

19.3. Інформаційні ресурси

1. Сервер дистанційного навчання «Moodle»
2. <http://chemstat.com.ru/node/41>
3. <http://www.chemometrics.ru/>
4. <http://www.uapf.com.ua/topic9.html21/3,956++96211111>
5. [https://www.selectscience.net/suppliers/advanced-chemistry-development,-inc,-\(acd+labs\)?compID=6070](https://www.selectscience.net/suppliers/advanced-chemistry-development,-inc,-(acd+labs)?compID=6070)
6. <https://www.acdlabs.com/index.php>

19.УКЛАДАЧІ ДОВІДНИКА ДЛЯ СТУДЕНТА (СИЛАБУСУ)

- 1.Ткачук Михайло Михайлович - асистент кафедри медичної та фармацевтичної хімії,
к.хім.н.