

МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
БУКОВИНСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ЗАТВЕРДЖУЮ

Проректор закладу вищої освіти
з науково-педагогічної роботи
Володимир ХОДОРОВСЬКИЙ

«___» _____ 2025 р.



ДОВІДНИК ДЛЯ СТУДЕНТА
(СИЛАБУС)
з вивчення навчальної дисципліни

«Комп'ютерне моделювання у фармації»

Галузь знань 22 Охорона здоров'я

Спеціальність 226 Фармація, промислова фармація

Освітній ступінь магістр

Курс навчання III

Форма здобуття освіти денна / заочна

Кафедра медичної та фармацевтичної хімії

Схвалено на засіданні кафедри медичної та фармацевтичної хімії
«18» серпня 2025 року (протокол №1).

Завідувач кафедри

(підпис)

(Віталій ЧОРНОУС)

Схвалено предметною методичною комісією з дисциплін фармацевтичного профілю
«27» серпня 2025 року (протокол №1).

Голова предметної методичної
комісії

(підпис)

(Олег ГЕРУШ)

Чернівці – 2025

**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	Юзькова Валентина Дмитрівна, асистент кафедри медичної та фармацевтичної хімії, кандидат хімічних наук, yuzkova.v@bsmu.edu.ua
Веб-сторінка кафедри на офіційному веб-сайті університету	https://www.bsmu.edu.ua/medichnoyi-ta-farmatsevtichnoyi-himiyi/
Веб-сайт кафедри	https://medchem.bsmu.edu.ua/
E-mail	chemistry@bsmu.edu.ua
Адреса	вул. Богомольця, 2 Чернівці, 58001, Україна
Контактний телефон	

1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО НАВЧАЛЬНУ ДИСЦИПЛІНУ

для студентів денної / заочної форми навчання

Статус дисципліни	обов'язкова
Кількість кредитів	3
Загальна кількість годин	90
Лекції	10 / 2
Практичні заняття	30 / 8
Самостійна робота	50 / 80
Вид заключного контролю	залік

2. ОПИС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ (АНОТАЦІЯ)

Основним завданням дисципліни «Комп'ютерне моделювання у фармації» є розвиток науково-дослідницьких компетенцій фахівців у області фармації. Комп'ютерне моделювання у фармації охоплює вивчення питань, пов'язаних з використанням математичних моделей як методу дослідження об'єктів і процесів у фармації.

В умовах швидкого розвитку комп'ютерних наук та систем штучного інтелекту, все більшого значення набуває метод дослідження об'єктів і процесів шляхом моделювання. Під час моделювання немає потреби створювати спеціальну експериментальну установку для здійснення кожного процесу; метод моделювання забезпечує простоту, оперативність і прийнятну вартість досліджень. Крім того, він дозволяє проаналізувати поведінку реальних систем в умовах, які неможливо реалізувати експериментально, за тих значень параметрів, 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 у тому випадку, коли існують експериментально підтверджені закономірності взаємодії його окремих елементів один з іншим і потрібно дослідити поведінку системи в цілому.

Предмет вивчення навчальної дисципліни «Комп'ютерне моделювання у фармації» охоплює основні можливості використання комп'ютерної техніки та програмного забезпечення для математичного планування і опрацювання результатів експерименту у фармації, а також математичного моделювання хімічних, хіміко-технологічних та фармакокінетичних процесів; що є необхідним для ефективної науково-дослідницької роботи фармацевта.

3. ПОЛІТИКА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

3.1. Перелік нормативних документів:

- Положення про організацію освітнього процесу – <https://cutt.ly/ArUqCMFh>;
- Інструкція щодо оцінювання навчальної діяльності студентів БДМУ в умовах впровадження Європейської кредитно-трансферної системи організації навчального процесу – <https://cutt.ly/yrUqVPvn>;

- Положення про порядок відпрацювання пропущених та незарахованих занять – <https://cutt.ly/jrUqBS36>;
- Положення про апеляцію результатів підсумкового контролю знань здобувачів вищої освіти – <https://cutt.ly/3rUqMAbV>;
- Кодекс академічної доброчесності – <https://cutt.ly/FrUq1ljK>;
- Положення про запобігання академічному плагиату – <https://cutt.ly/MrUq6QAt>;
- Положення про порядок та умови обрання здобувачами освіти вибірових дисциплін – <https://cutt.ly/srUwo6Ci>;
- Положення про порядок визнання результатів навчання, здобутих шляхом неформальної та/або інформальної освіти – <https://cutt.ly/SrUwplie>;
- Правила поведінки здобувачів освіти – <https://cutt.ly/ErUq72rZ>;
- Правила внутрішнього трудового розпорядку – <https://cutt.ly/UrUwiACe>.

3.2. Політика щодо дотримання принципів академічної доброчесності здобувачів освіти:

- самостійне виконання навчальних завдань поточного та підсумкового контролю 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.

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

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

3.4. Політика щодо відвідування занять здобувачами освіти:

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

3.5. 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.

4. ПРЕРЕКВІЗИТИ 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
Аналітична хімія	Токсикологічна та судова хімія
Фізична та колоїдна хімія	Технологія ліків
Інформаційні технології у фармації	Фармацевтична хімія
Органічна хімія	Фармакотерапія з фармакокінетикою
Фармацевтичні обчислення і статистика	Лікарська токсикологія
Біологічна хімія	Стандартизація лікарських засобів та системи якості у фармації

5. МЕТА ТА ЗАВДАННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ:

5.1. **Метою** вивчення дисципліни «Комп'ютерне моделювання у фармації» є створення для майбутніх фахівців можливостей щодо оволодіння знаннями, навичками та вміннями, необхідними для використання комп'ютерної техніки, програмного забезпечення та онлайн-сервісів для здійснення дослідницько-пошукової та наукової діяльності фармацевта.

5.2. Основними **завданнями** вивчення дисципліни є формування міцних фундаментальних знань з фізико-хімічних методів аналізу та опанування студентами методик використання комп'ютерної техніки для опрацювання експериментальних результатів фізико-хімічного аналізу та для здійснення базового математичного моделювання біологічних, хімічних, хіміко-технологічних і фармакокінетичних процесів.

6. КОМПЕТЕНТНОСТІ, ФОРМУВАННЮ ЯКИХ СПРИЯЄ НАВЧАЛЬНА ДИСЦИПЛІНА:

6.1. **Інтегральна компетентність:** здатність розв'язувати типові та ускладнені задачі, практичні проблеми у професійній фармацевтичній діяльності, вирішення яких вимагає застосування теоретичного матеріалу, проведення експериментальних (аналітичних, фізико-хімічних тощо) досліджень та використання методів комп'ютерного моделювання.

6.2. **Загальні компетентності:**

ЗК 02. Знання та розуміння предметної області; розуміння професійної діяльності.

ЗК 05. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт.

ЗК 09. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології.

6.3. **Фахові (спеціальні) компетентності:**

ФК01. Здатність інтегрувати знання та розв'язувати складні задачі фармації у широких або мультидисциплінарних контекстах.

ФК02. Здатність збирати, інтерпретувати та застосовувати дані, необхідні для професійної діяльності, здійснення досліджень та реалізації інноваційних проєктів у сфері фармації.

7. РЕЗУЛЬТАТИ НАВЧАННЯ.

Навчальна дисципліна забезпечує формування таких **програмних результатів навчання (ПРН):**

ПРН 01. Мати та застосовувати спеціалізовані концептуальні знання у сфері фармації та суміжних галузях з урахуванням сучасних наукових здобутків.

ПРН 02. Критично осмислювати наукові і прикладні проблеми у сфері фармації.

ПРН 03. Мати спеціалізовані знання та уміння/навички для розв'язання професійних проблем і задач, у тому числі з метою подальшого розвитку знань та процедур у сфері фармації.

ПРН 07. Збирати необхідну інформацію щодо розробки та виробництва лікарських засобів, використовуючи фахову літературу, патенти, бази даних та інші джерела; систематизувати, аналізувати й оцінювати її, зокрема, з використанням статистичного аналізу.

ПРН 08. Розробляти і реалізовувати інноваційні проєкти у сфері фармації, а також дотичні міждисциплінарні проєкти з урахуванням технічних, соціальних, економічних, етичних, правових та екологічних аспектів.

ПРН11. Визначати переваги та недоліки лікарських засобів природного та синтетичного походження різних фармакологічних груп з урахуванням їхніх хімічних, фізико-хімічних, біофармацевтичних, фармакокінетичних та фармакодинамічних особливостей та виду лікарської форми. Рекомендувати споживачам лікарські засоби та інші товари аптечного асортименту з наданням консультативної допомоги та фармацевтичної опіки.

ПРН23. Визначати основні хіміко-фармацевтичні характеристики лікарських засобів природного і синтетичного походження; обирати та/або розробляти методики контролю якості з метою їх стандартизації з використанням фізичних, хімічних, фізико-хімічних, біологічних, мікробіологічних та фармако-технологічних методів згідно з чинними вимогами.

В результаті вивчення навчальної дисципліни здобувач освіти повинен:

7.1. Знати:

- методи опрацювання експериментальних даних фізико-хімічного аналізу;

- програмне забезпечення сучасних складних 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 (ІЧ та УФ-спектроскопія, ЯМР-спектроскопія, мас-спектроскопія, хроматографія, хромато-маспектроскопія);

7.2. Уміти:

- 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 їх основі здійснювати інтерпретацію спектрів ЯМР, ІЧ, 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.

7.3. Демонструвати:

- здатність налагоджувати професійну співпрацю під час планування та моделювання досліджень;
- здатність нести відповідальність за своєчасне виконання завдань.

8. ІНФОРМАЦІЙНИЙ ОБСЯГ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

9.1. Конкретні цілі вивчення модуля (змістових модулів).

Змістовий модуль 1. Опрацювання експериментальних даних в Mathcad.

Конкретні цілі:

- навчитися визначати середнє значення, дисперсію (довірчий інтервал); середньоквадратичне відхилення, коефіцієнти кореляції;
- перевірка статистичних гіпотез на прикладі задач з фізико-хімічного аналізу аналітичної, фармацевтичної, фізико-колоїдної хімії та хімічної метрології;
- здобути вміння створювати, аналізувати та розв'язувати у Mathcad математичні моделі іонної хімічної рівноваги, газових рівноваг, стаціонарного стану хімічних та електрохімічних систем;
- навчитися створювати аналізувати та розв'язувати у Mathcad математичні моделі хімічних та технологічних процесів;
- розв'язувати звичайні диференціальні рівняння, крайові задачі та диференціальні рівняння в частинних похідних засобами Mathcad.

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

Конкретні цілі:

- ознайомитися з методикою системного вивчення змінних перед експериментом для оптимізації діапазонів кожної змінної;
- навчитися опрацьовувати дані РХ/МС, УФ-спектроскопії та іншої доступної аналітичної інформації за допомогою програмних засобів для ідентифікації сполук в режимі реального часу;
- освоїти методи автоматизації процесу оцінки відповідності пропонованої структури та експериментальних даних для простих випадків 1D, 2D спектрів ^1H – ^{13}C HSQC ЯМР;

- здобути навички автоматизації прогнозування та ідентифікації метаболітів за даними РХ/МС, УФ-спектроскопії та ізотопного сканування;
- навчитися створювати карти і звіти щодо біотрансформації;
- здобути навички оптимізації доклінічної розробки рецептур, швидкого визначення сольових форм та поліморфів;
- здійснювати обмін плануваннями за допомогою баз даних;
- вміти знаходити взаємозв'язки між прогнозованими на основі структури фізико-хімічними властивостями та хроматографічними результатами;
- усвідомити практичне значення фахового програмного забезпечення та онлайн баз даних у розробці лікарських засобів.

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

Конкретні цілі:

- навчитися моделювати просторову будову молекул;
- здійснювати розрахунки фізико-хімічних констант лікарських препаратів (температури кипіння, показника константи кислотності рКа, теплоти випаровування, розчинності);
- дізнатися основні етапи відбору і аналізу потенційних біологічно активних сполук;
- ознайомитися з методами комп'ютерного моделювання біологічно-активних речовин (ComputerAidedDrugDesign,CADD);
- навчитися аналізувати взаємозв'язок "структура-активність" біологічно активної речовини методами комп'ютерного моделювання (Structure-ActivityRelationships =SAR; QuantitativeStructure-ActivityRelationships =QSAR);
- ознайомитися з прикладними програмами для аналізу біологічної активності лікарських препаратів (PASS - Prediction of Activity Spectra for Substances), розвинути навички аналізу лікарських препаратів за встановленими параметрами.

8.2. Тематична структура модуля (змістових модулів).

Модуль 1

Змістовий модуль 1. Опрацювання експериментальних даних в Mathcad.

Тема 1. Опрацювання експериментальних даних в Mathcad.

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

Тема 3. Створення та аналіз динамічних моделей в Mathcad.

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.

Тема 2. Автоматичне розпізнання сполук в рідинній хроматографії, мас- спектроскопії, УФ-спектроскопії програмними засобами ACD/Labs.

Тема 3. Автоматичне розпізнавання даних ЯМР-спектроскопії з допомогою системи ACD / Labs Automated Structure Verification (ASV).

Тема 4. Ідентифікація метаболітів з допомогою MetaSense.

Тема 5. Оптимізація для попередніх досліджень на основі ACD-Labs.

Тема 6. Скринінг ефективних хроматографічних методів з допомогою ACD / Labs Chromatographic Methods.

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

Тема 1. Розрахунок фізико-хімічних констант лікарських препаратів в ACDLabs.

Тема 2. Основи комп'ютерного прогнозування біологічної активності органічних молекул в програмі PASS.

9. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

(для студентів денної / заочної форми навчання)

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин				
	Усього	у тому числі			
		Аудиторні		Самостійна	Індиві-
		Лекції	Практичні	робота	дуальна
1	2	3	4	5	6
Модуль 1. Опрацювання експериментальних даних фізико-хімічного аналізу та моделювання в Mathcad					
Змістовий модуль 1. Опрацювання експериментальних даних в Mathcad					
Тема 1. Опрацювання експериментальних даних в Mathcad.	8 / 9	2 / -	2 / 2	4 / 7	-
Тема 2. Створення та аналіз лінійних рівноважних, стаціонарних та статичних моделей в Mathcad.	10 / 7	2 / -	4 / -	4 / 7	-
Тема 3. Створення та аналіз динамічних моделей в Mathcad.	10 / 7	2 / -	4 / -	2 / 5	2 / 3
Разом за змістовим модулем 1	28 / 24	6 / -	10 / 2	10 / 19	2 / 3
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 / 7	2 / -	2 / -	4 / 7	-
Тема 2. Автоматичне розпізнання сполук в рідинній хроматографії, маспектроскопії, УФспектроскопії програмними засобами ACD/Labs	6 / 7	-	2 / -	1 / 3	3 / 5
Тема 3. Автоматичне розпізнавання даних ЯМР-спектроскопії з допомогою системи ACD / Labs Automated Structure Verification (ASV)	6 / 7	-	2 / -	1 / 3	3 / 4
Тема 4. Ідентифікація метаболітів з допомогою MetaSense.	6 / 7	-	2 / -	4 / 7	-
Тема 5. Оптимізація для попередніх досліджень на основі ACD-Labs.	6 / 7	-	2 / -	4 / 7	-
Тема 6. Скринінг ефективних хроматографічних методів з допомогою ACD / Labs Chromatographic Methods.	6 / 8	-	2 / -	4 / 8	-
Разом за змістовим модулем 2	38 / 44	2 / -	12 / -	18 / 35	6 / 9
Змістовий модуль 3. Розрахунок фізико-хімічних констант і параметрів лікарських засобів. Прогнозування їх біологічної активності.					
Тема 1. Розрахунок фізико-хімічних констант лікарських	13 / 12	2 / 2	4 / 2	7 / 8	-

препаратів в ACDLabs					
Тема 2. Основи комп'ютерного прогнозування біологічної активності органічних молекул в програмі PASS.	11 / 10	-	4 / 2	7 / 8	-
Разом за змістовим модулем 3	24 / 22	2 / 2	8 / 4	14 / 16	-
УСЬОГО ГОДИН	90 / 90	10 / 2	30 / 6	42 / 70	8 / 12

10. ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ

(для студентів денної / заочної форми навчання)

№ з/п	Назва теми	Кількість 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 / 2
Разом		10 / 2

11. ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ

(для студентів денної / заочної форми навчання)

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Опрацювання експериментальних даних в Mathcad.	2 / 2
2	Створення та аналіз лінійних рівноважних, стаціонарних та статичних моделей в Mathcad.	4 / -
3	Створення та аналіз динамічних моделей в Mathcad.	4 / -
4	Використання QbD в хроматографії для фармацевтичних задач на основі платформи ACD/Labs.	2 / -
5	Автоматичне розпізнавання сполук в рідинній хроматографії, мас-спектроскопії, УФ-спектроскопії програмними засобами ACD/Labs.	2 / 2
6	Автоматичне розпізнавання даних ЯМР-спектроскопії за 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 ACD-Labs	4 / 2

11	Основи комп'ютерного прогнозування біологічної активності органічних молекул в програмі PASS.	4 / 2
РАЗОМ		30 / 8

12. ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН САМОСТІЙНОЇ РОБОТИ

(для студентів денної / заочної форми навчання)

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Опрацювання експериментальних даних в Mathcad.	4 / 7
2	Створення та аналіз лінійних рівноважних, стаціонарних та статичних моделей в Mathcad.	4 7
3	Створення та аналіз динамічних моделей в Mathcad.	2(2) / 5(3)
4	Використання QbD в хроматографії для фармацевтичних задач на основі платформи ACD/Labs.	4 / 7
5	Автоматичне розпізнання сполук в рідинній хроматографії, мас-спектроскопії, УФ-спектроскопії програмними засобами ACD/Labs.	1(3) / 3(5)
6	Автоматичне розпізнавання даних ЯМР-спектроскопії за допомогою системи ACD / Labs Automated Structure Verification (ASV)	1(3) / 3(4)
7	Ідентифікація метаболітів з допомогою MetaSense.	4 / 7
8	Оптимізація для попередніх досліджень на основі ACD-Labs.	4 / 7
9	Скринінг ефективних хроматографічних методів за допомогою ACD / Labs Chromatographic Methods.	4 / 8
10	Розрахунок фізико-хімічних констант лікарських препаратів в ACD-Labs	7 / 8
11	Основи комп'ютерного прогнозування біологічної активності органічних молекул в програмі PASS.	7 / 8
РАЗОМ		42(8) / 68(12)

13. ПЕРЕЛІК ІНДИВІДУАЛЬНИХ ЗАВДАНЬ

(Обирається одне завдання з переліку)

- Опрацювати основи побудови математичних моделей хімічної кінетики. Створити в Mathcad математичну модель для розрахунку кінетики складної хімічної реакції та розрахувати її кінетичні характеристики.
- Опрацювати та систематизувати основні можливості сайтів щодо аналізу даних мас-спектроскопії: база даних Національного інституту стандартів і технології США NIST Chemistry WebBook; база даних спектрів органічних сполук в Spectral Database for Organic Compounds (SDBS).
- Опрацювати і систематизувати основні можливості сайтів щодо аналізу даних ЯМР-спектроскопії: ChemSpider, Organic Chemistry Info, Proton NMR Chemical Shifts, 13 NMR Chemical Shifts, Sadtler Spectral Handbooks, The Sadtler Handbook of Proton NMR Spectra.
- Опрацювати і систематизувати основні можливості сайтів з структурованими базами даних: Chemical Information Sources/SIRCh, Organic Chemistry Resources Worldwide, Sixty-Four Free Chemistry Databases, Open Directory, Spectra & Spectral Data.

5. Опрацювати і систематизувати основні можливості сайтів щодо аналізу даних ІЧ-спектроскопії: NIST Chemistry WebBook, SDBS - Spectral Database for Organic Compounds, The Sadtler Handbook of Infrared Spectra.

14. ЗАВДАННЯ ДЛЯ САМОСТІЙНОЇ РОБОТИ

1. Способи інтерполяції та прогнозування даних: функції інтерполяції і прогнозування, застосувати вказані функції для деякого масиву даних; побудувати відповідні графіки.
2. Перевід графічно заданої функції (результатів експерименту) у табличну на прикладі вольт амперних, полярографічних, потенціометричних кривих.
3. Лінійна, кубічна, поліноміальна сплай-інтерполяція та апроксимація на прикладі задач з фізико-хімічного аналізу та лабораторних робіт з аналітичної, фармацевтичної, фізикоколоїдної хімії.
4. Способи апроксимації та згладжування даних: ознайомитися із основною функцією regress та іншими важливими функціями: line; intercept; slope, medfit, loess, interp:loess, span, stderr, для деякого масиву даних застосувати вказані функції; побудувати відповідні графіки.
5. Визначення виборочного середнього значення, дисперсії, середньоквадратичного відхилення, коефіцієнтів коваріації та кореляції на прикладі задач з фізико-хімічного аналізу аналітичної, фармацевтичної та фізичної і колоїдної хімії.
6. Створення математичних моделей іонної рівноваги створити математичні моделі для розрахунку рН розчину сильної кислоти (наприклад HCl, HBr, HI, HNO₃, H₂SO₄, HClO₄) заданої концентрації; ввести модель в Mathcad, розрахувати залежність рН від заданої концентрації кислоти та представити результати графічно.
7. Основні засоби розв'язку систем звичайних диференціальних рівнянь та рівнянь в частинних похідних в Mathcad враховуючи крайові задачі та задачі Коші: Adams, AdamsBDF, BDF, Bulstoer, bvalfit, Jacob, multigrid, numol, Odesolve, Pdesolve, Radau, relax, Rkadapt, rkfixed, sbval, statespace, Stiffb, Stiff. Області їх використання, особливості застосування та необхідні для заповнення аргументи.
8. Моделі ефективності розчинників: зворотно-фазової хроматографії, ІЕС іонообмінної хроматографії, НІЛІС хроматографії з гідрофільною взаємодією, НІС хроматографії з гідрофобною взаємодією, NPC нормально-фазової хроматографії.
9. Діапазони оперативного проектування методу (MODR). Напівтеоретичні моделі хроматографії. Основні поняття хроматограми: час утримання, пікова ширина, площа піку, пікова асиметрія основного піку, мертвий час, потік.
10. Використання ACD /AutoChrom. Розрахунки властивостей Phys-Chem для аналітів з відомими структурами до MD (pKa, LogP), керування програмою для HPLC, UHPLC та LC / MS; функції спектрів LC-GC-UV-LC / MS-GC / MS-SPECTROSCOPY; Intellextract – автоматизоване картографування піків на основі спектрів MS / UV, ідентифікація та узгодження піків на основі спектральної інформації (MS; UV); функції ACD / LC & GC Simulator.
11. Оптимізація і удосконалення різних аспектів обробки, аналізу і прогнозування ЯМР. Автоматизація оцінки спектрів і структур для підвищення продуктивності.
12. 3D-графіка. Моделювання просторової будови молекул. Програми утворення назв органічних молекул згідно номенклатури IUPAC.
13. Розрахунок ЯМР1H спектрів з допомогою HNMR DB. Моделювання ЯМР13C спектрів з допомогою CNMR DB. Моделювання ЯМР35P, ЯМР19F спектрів з допомогою XNMR DB.

15. МЕТОДИ ТА ФОРМИ ПРОВЕДЕННЯ КОНТРОЛЮ

16.1. Форма, порядок, методика та критерії оцінювання поточної навчальної діяльності.

Види контролю: вихідний, поточний і підсумковий.

Вихідний контроль теоретичної підготовки здійснюється на початку кожного заняття.

Поточний контроль здійснюється на кожному занятті відповідно до конкретних цілей.

Використовується стандартизована форма контролю теоретичної та практичної підготовки

студентів. На кожному практичному занятті студент відповідає на теоретичні питання за темою практичного заняття, знання яких необхідні для розуміння поточної теми; питання лекційного курсу і самостійної роботи, які стосуються поточного заняття; демонструє практичні навички; згідно з темою практичного заняття виконує практичні завдання у відповідних програмних середовищах або онлайн-сервісах; виконує тестові завдання на платформі eOsvita.

Самостійна робота студентів оцінюється під час поточного контролю теми на відповідному занятті. Форма підсумкового контролю, відповідно до освітньо-професійної програми, – залік.

16.2. Форма, порядок, методика та критерії оцінювання індивідуальної самостійної роботи.

За виконання різних видів індивідуальних завдань студенти можуть отримати бали, які додаються до суми балів, набраних студентом на заняттях під час поточної навчальної діяльності. Бали за індивідуальні завдання нараховуються студентові лише за умов успішного їх виконання та захисту.

Результати індивідуальної самостійної роботи можуть бути представлені як:

а) файл Mathcad з математичною моделлю відповідного хімічного або фізико-хімічного процесу;

б) підготовка презентації у PowerPoint, Canva тощо;

в) доповідь на засіданні наукового гуртка;

г) виступ на науково-практичній конференції;

д) стаття в науковому або науково-популярному журналі.

Оцінювання індивідуальної самостійної роботи студента враховує наступні критерії: відповідність темі, актуальність, структурованість, обсяг, оригінальність, обґрунтованість висновків, дотримання принципів академічної доброчесності.

За виконання індивідуальної самостійної роботи студенти можуть отримати 5 балів.

16.3. Умови допуску до складання підсумкового контролю.

До підсумкового контролю допускаються студенти, які відвідали усі аудиторні навчальні заняття передбачені навчальною програмою з дисципліни та успішно виконали необхідні завдання, одержавши бали за кожне практичне заняття (за наявності пропусків – своєчасно їх відпрацювали) та набрали суму балів не меншу за мінімальну (120 балів).

Студенту, який з поважних чи без поважних причин мав пропуски навчальних занять, дозволяється відпрацювати академічну заборгованість до певного визначеного терміну.

16.4. Форма, порядок, методика та критерії оцінювання під час проведення підсумкового контролю.

Підсумковий контроль проводиться у формі заліку, що полягає в оцінці засвоєння студентом навчального матеріалу з комп'ютерного моделювання у фармації виключно на підставі результатів виконання ним всіх обов'язкових видів робіт на практичних заняттях, самостійної роботи та індивідуальної самостійної роботи. Виконання індивідуальної самостійної роботи здійснюється за бажанням студента і не є обов'язковим.

Семестровий залік не передбачає окремого заняття для приймання заліку та не передбачає обов'язкову присутність студентів.

16. ПЕРЕЛІК ПИТАНЬ ДО ПІДСУМКОВОГО КОНТРОЛЮ

Підсумковий контроль проводиться у формі заліку на підставі результатів виконання студентом всіх обов'язкових видів робіт та індивідуальної самостійної роботи, тому окремий перелік питань для модульного контролю не укладається.

17. СХЕМА НАРАХУВАННЯ ТА РОЗПОДІЛУ БАЛІВ

Мінімальна кількість балів, яку можна отримати за вивчення курсу «Комп'ютерне моделювання у фармації» з оцінкою «зараховано» складає 120 балів.

Студент отримує оцінку «не зараховано», якщо він має невідпрацьовані пропуски навчальних занять (практичних, семінарських та лекцій) і кількість балів за поточний контроль менша за мінімальну.

Максимальна кількість балів, яку студент може набрати під час вивчення курсу «Комп'ютерне моделювання у фармації», становить 200 балів, в тому числі за поточну навчальну діяльність – 195 (для заочної форми навчання - 192 бали), за результатами індивідуальної самостійної роботи – 5 балів (для заочної форми навчання – 8 балів).

Конвертація традиційних оцінок «5», «4», «3», «2» у бали наведена у таблиці для денної / заочної форми навчання.

Номер модуля, 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»		
Модуль 1 (3 кредити, 90 годин)	3	15 / 4	13 / 48	10 / 38	8 / 30	0	5 / 8	120

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 120 до 149	"3"
Нижче 120	"2"

18. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

19.1 Основна (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.

19.2. Допоміжна

1. Медична інформатика в модулях: практикум: навчальний посібник (ВНЗ IV р. а.) / І.Є. Булах, Л.П. Войтенко, М.Р. Мруга та ін.; за ред. І.Є. Булах. — 2-е вид., випр. Тернопіль, ТДМУ, «Медицина», 2012. 208 с.

2. Комп'ютерне моделювання і оптимізація хімічних досліджень: конспект лекцій до змістового модуля «Моделювання, планування та оптимізація хімічних досліджень» для здобув. другого (магістер.) рівня вищ. освіти спец. 102 «Хімія» / Л. М. Солдаткіна. Електронні текстові дані (1 файл: 1,4 МБ). Одеса : Одес. нац. ун-т ім. І. І. Мечникова, 2024. 69 с.

3. Гарькава В. Ф. та ін. Комп'ютерне моделювання та інформаційні технології в фармації: Монографія. – Warsaw: RS Global Sp. z O.O., 2021. 43 с.

5. Статистична обробка даних. Бабак В.П., Білецький А.Я., Приставка О.П., Приставка П.О. / Монографія. К.: МІВВЦ, 2001. 388 с.

19.3 Інформаційні ресурси

1. Електронна освітня платформа БДМУ «eOsvita»

2. Advanced Chemistry Development, Inc., (ACD/Labs) [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)
3. <https://www.acdlabs.com/index.php>
4. Prediction of Activity Spectra for Substances <https://genexplain.com/pass/>
5. Consulting and solutions GmbH <http://www.akosgmbh.de/index.html>
6. NIST Chemistry WebBook <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
7. Довідниковий сайт ChemSpider <http://www.chemspider.com/>

19. УКЛАДАЧІ ДОВІДНИКА ДЛЯ СТУДЕНТА (СИЛАБУСУ)

1. Валентина ЮЗЬКОВА – асистент кафедри медичної та фармацевтичної хімії, кандидат хімічних наук

Начальник навчального відділу

Сергій САЖИН