

ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ДАНИЛА ГАЛИЦЬКОГО

Кафедра загальної, біонеорганічної, фізколоїдної хімії



**ЗАТВЕРДЖУЮ**  
Проректор з наукової роботи  
проф. Вікторія СЕРГІЄНКО

\_\_\_\_\_ 2024 р.

**РОБОЧА ПРОГРАМА  
З ДИСЦИПЛІНИ ВК 2.20  
«IN SILICO ПІДХОДИ  
ПРИ ПОШУКУ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ РЕЧОВИН –  
ПОТЕНЦІЙНИХ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ»**

**за спеціальністю 226 Фармація, промислова фармація  
галузі знань 22 Охорона здоров'я  
Кваліфікація: доктор філософії (Ph.D.)**

**Обговорено та ухвалено**  
на методичному засіданні кафедри  
загальної, біонеорганічної, фізколоїдної  
хімії  
Протокол №14  
від “\_18\_” березня 2024 р.  
Завідувач кафедри

\_\_\_\_\_ проф. Ірина ДРАПАК

**Затверджено**  
профільною науково-методичною радою  
з фізико-хімічних дисциплін  
Протокол №\_1\_  
від “\_4\_” квітня 2024 р.  
Голова профільної науково-методичної  
ради

\_\_\_\_\_ доц. Ірина ГАЛЬКЕВИЧ

**Програма складена:**

д.фарм.н., проф. Драпак І.В.

**Рецензент:** д.фарм.н, доц. Лозинський А.В.

## ВСТУП

**Програма вивчення дисципліни «*In silico* підходи при пошуку біологічно активних речовин – потенційних лікарських засобів»** для здобувачів ступеня доктора філософії галузі знань 22 «Охорона здоров'я» спеціальності 226 *Фармація, промислова фармація*.  
складена згідно з вимогами проекту Стандарту вищої освіти України

### Опис навчальної дисципліни (анотація)

Програма дисципліни «*In silico* підходи при пошуку біологічно активних речовин – потенційних лікарських засобів» для здобувачів ступеня доктор філософії складена у відповідності з освітньо-кваліфікаційними характеристиками (ОКХ) і освітньо-професійними програмами (ОПП) та навчальним планом розробленим на принципах Європейської кредитно-трансферної системи (ECTS).

Навчальна дисципліна закладає умови щодо інтеграції науковців у європейську медичну науку; закладає основи формування навичок для планування та проведення медико-біологічних досліджень; ґрунтується на вивченні таких дисциплін як медична хімія, фармацевтична хімія, біостатистика, медична інформатика.

Для виконання даної програми в процесі навчання передбачено: лекції, семінари, самостійна робота, консультації.

### СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ «*In silico* підходи при пошуку біологічно активних речовин – потенційних лікарських засобів»

Структура навчальної дисципліни	Кількість кредитів, годин, з них				Рік навчання	Вид контролю
	Всього	Лекцій	Практичні	Самостійна робота		
<i>In silico</i> підходи при пошуку біологічно активних речовин – потенційних лікарських засобів	90 годин 3 кредити ECTS	10	38	42	III	залік

### Предметом вивчення навчальної дисципліни є

використання новітніх *in silico* підходів (віртуальний скринінг: молекулярний докінг, QSAR, та ін.) при створенні біологічно активних речовин – потенційних лікарських засобів.

**Міждисциплінарні зв'язки:** медична хімія, фармацевтична хімія, медична інформатика, біостатистика.

### МЕТА ТА ЗАВДАННЯ ДИСЦИПЛІНИ

Метою викладання навчальної дисципліни є: ознайомлення із сучасними *in silico* (комп'ютерними) підходами до створення біологічно активних речовин - потенційних лікарських засобів

Цілі та задачі вивчення дисципліни - оволодіння сучасними *in silico* підходами *drug desing*.  
Основні завдання дисципліни:

- ознайомитися із лікарськими засобами, які були змодельовані з використанням *in silico* підходів; історичні аспекти, успіхи та досягнення, роль та значення в етапах «від молекули до препарату»;
- ознайомитись з основними стратегіями *drug design*;
- ознайомитись із параметрами структури молекули - молекулярні дескриптори, їх класифікація, характеристика, розрахунок.
- ознайомитися та засвоїти інноваційні *in silico* підходи до створення біологічно активних речовин (віртуальний скринінг, молекулярне моделювання, молекулярний докінг, QSAR-аналіз, оптимізація структури сполук-лідерів, комбінаторна хімія, високоефективний фармакологічний скринінг тощо) та програмного забезпечення для їх реалізації;

***Компетентності та результати навчання, формування яких забезпечує вивчення дисципліни.***

***Інтегральна компетентність:***

Здатність застосовувати набуті загальні і фахові компетентності для вирішення складних задач у професійній фармацевтичній діяльності, в тому числі дослідницького та інноваційного характеру; здійснення професійної діяльності на відповідній посаді; здійснення інновацій; здатність ефективно вирішувати комплексні наукові та практичні проблеми в галузі фармації, організувати і виконувати власну науково-дослідницьку роботу з метою генерування нових систематизованих знань, що мають теоретичне і практичне значення, можуть успішно впроваджуватись у вітчизняний й міжнародний дослідницький та освітній простір, практичну фармацію.

***Загальні:***

- ЗК1. Здатність відповідально ставитися до завдань і обов'язків та збереження довкілля, бути критичним та самокритичним, діяти з соціальною відповідальністю і громадянською свідомістю.
- ЗК2. Здатність до абстрактного й аналітичного мислення і генерування ідей та навчання упродовж професійного життя і бути сучасно навченим.
- ЗК3. Здатність до усного та письмового спілкування як українською, так й іноземною (переважно англійською) мовами для наукової комунікації, що забезпечує ефективну професійну діяльність.

***Фахові:***

- ФК1. Здатність до розуміння предметної області за напрямком і тематикою фармацевтичних досліджень і професійної діяльності.
- ФК2. Здатність виявляти потребу в додаткових знаннях у сфері фармації та за напрямком наукових досліджень, генерувати наукові гіпотези.
- ФК3. Здатність до застосування категорійно-поняттєвого апарату, новітніх теорій, концепцій, технологій і методів, необхідних для розв'язання комплексних проблем галузі охорони здоров'я.
- ФК4. Здатність формулювати дослідницькі питання, розробляти проекти наукових досліджень.
- ФК5. Здатність володіти сучасними методами наукового дослідження, обирати їх та критерії оцінки дослідження відповідно до цілей і завдань наукового проєкту.
- ФК6. Здатність інтерпретувати результати наукових досліджень, проводити їх коректний аналіз та узагальнення.
- ФК7. Здатність до представлення результатів наукових досліджень в усній і письмовій формі відповідно до національних та міжнародних стандартів.

***Програмні результати навчання:***

ПРН 1. Володіти концептуальними та методологічними знаннями в галузі охорони здоров'я та бути здатним застосовувати їх до професійної діяльності при вирішенні дослідницьких і практичних завдань.

ПРН 2. Вміти проектувати та здійснювати комплексні дослідження, у т.ч. міждисциплінарні, на базі цілісного системного наукового світогляду з використанням знань в галузі філософії наукового пізнання.

ПРН 3. Планувати та реалізувати на практиці оригінальне самостійне наукове дослідження, яке повинно містити наукові положення та науково обґрунтовані результати, що розв'язують важливу або конкретну наукову або науково-прикладну проблему, яка що має істотне значення для галузі охорони здоров'я.

ПРН 4. Використовувати сучасні інформаційні джерела національного та міжнародного рівня для оцінки стану вивченості об'єкта досліджень і актуальності наукової проблеми.

ПРН 5. Вміти формулювати наукові гіпотези, мету і завдання наукового дослідження.

ПРН 6. Вміти розробляти дизайн та план наукового дослідження.

ПРН 7. Вміти виконувати оригінальне наукове дослідження.

ПРН 8. Вміти проводити аналіз, систематизацію й інтерпретацію результатів наукових досліджень, використовувати методи статистичної обробки даних.

ПРН 9. Вміти пояснювати принципи, специфічність і чутливість методів дослідження, інформативність обраних показників.

ПРН 10. Вміти інтегрувати наявні методики й методи досліджень та адаптувати їх для розв'язання наукових завдань при проведенні наукових досліджень.

ПРН 11. Вміти інтерпретувати та аналізувати інформацію з використанням новітніх інформаційних технологій.

#### **Матриця відповідності визначених Стандартом компетентностей дескрипторам НРК.**

№	Компетентність	Знання	Уміння	Комунікація	Автономія та відповідальність
<b>Інтегральна компетентність</b>					
	Здатність застосовувати набуті загальні і фахові компетентності для вирішення складних задач у професійній фармацевтичній діяльності, в тому числі дослідницького та інноваційного характеру; здійснення професійної діяльності на відповідній посаді; здійснення інновацій.	ЗН1	УМ2		АВ3
<b>Загальні компетентності</b>					
ЗК01	Здатність відповідально ставитися до завдань і обов'язків та збереження довкілля, бути критичним та самокритичним, діяти з соціальною відповідальністю і громадянською свідомістю.		УМ2		
ЗК02	Здатність до абстрактного й аналітичного мислення і генерування ідей та навчання упродовж професійного життя і бути сучасно навченим.	ЗН1	УМ1		
ЗК03	Здатність до усного та письмового спілкування як українською, так й іноземною (переважно англійською) мовами для наукової комунікації, що забезпечує ефективну професійну діяльність			К1	
<b>Фахові компетентності</b>					
ФК01	Здатність до розуміння предметної області за напрямком і тематикою досліджень і професійної діяльності.	ЗН1	УМ1 УМ2		АВ1 АВ2
ФК02	Здатність виявляти потребу в додаткових	ЗН1	УМ1	К1	АВ1

	знаннях у сфері фармації та за напрямком наукових досліджень, генерувати наукові гіпотези.				
ФК03	Здатність до застосування категорійно-поняттєвого апарату, новітніх теорій, концепцій, технологій і методів, необхідних для розв'язання комплексних проблем галузі охорони здоров'я	ЗН1	УМ1	К1	АВ2
ФК 04	Здатність формулювати дослідницькі питання, розробляти проекти наукових досліджень				
ФК05	Здатність володіти сучасними методами наукового дослідження, обирати їх та критерії оцінки дослідження відповідно до цілей і завдань наукового проекту	ЗН1	УМ1 УМ2 УМ3		АВ1 АВ2
ФК06	Здатність інтерпретувати результати наукових досліджень, проводити їх коректний аналіз та узагальнення	ЗН1	УМ1 УМ2 УМ3		АВ1 АВ2 АВ3
ФК 07	Здатність до представлення результатів наукових досліджень в усній і письмовій формі відповідно до національних та міжнародних стандартів	ЗН1	УМ1 УМ2 УМ3		АВ1 АВ2 АВ3

- **ЗН1** Спеціалізовані концептуальні знання, що включають сучасні наукові здобутки у сфері професійної діяльності або галузі знань і є основою для оригінального мислення та проведення досліджень, критичне осмислення проблем у галузі та на межі галузей знань.
- **УМ1** Спеціалізовані уміння/навички розв'язання проблем, необхідні для проведення досліджень та/або провадження інноваційної діяльності з метою розвитку нових знань та процедур.
- **УМ2** Здатність інтегрувати знання та розв'язувати складні задачі у широких мультидисциплінарних контекстах.
- **УМ3** Здатність розв'язувати проблеми у нових або незнайомих середовищах за наявності неповної або обмеженої інформації з урахуванням аспектів соціальної та етичної відповідальності.
- **К1** Зрозуміле і недвозначне донесення власних знань, висновків та аргументації до фахівців і нефахівців, зокрема, до осіб, які навчаються.
- **АВ1** Управління робочими або навчальними процесами, які є складними, непередбачуваними та потребують нових стратегічних підходів.
- **АВ2** Відповідальність за внесок до професійних знань і практики та/або оцінювання результатів діяльності команд та колективів.
- **АВ3** Здатність продовжувати навчання з високим ступенем автономії.



#### Відповідність визначених Стандартом результатів навчання та компетентностей

Код програмного результату	Результат навчання	Код компетентності
ПРН01	Володіти концептуальними та методологічними знаннями в галузі охорони здоров'я та бути здатним застосовувати їх до професійної діяльності при вирішенні дослідницьких і практичних завдань	ЗК 01, 02; ФК 01
ПРН02	Вміти проектувати та здійснювати комплексні дослідження, у т.ч. міждисциплінарні, на базі цілісного системного наукового світогляду з використанням знань в галузі філософії наукового пізнання.	
ПРН03	Планувати та реалізувати на практиці оригінальне самостійне наукове дослідження, яке повинно містити наукові положення та	

	науково обґрунтовані результати, що розв'язують важливу або конкретну наукову або науково-прикладну проблему, яка що має істотне значення для галузі охорони здоров'я.	
ПРН04	Використовувати сучасні інформаційні джерела національного та міжнародного рівня для оцінки стану вивченості об'єкта досліджень і актуальності наукової проблеми.	ЗК 01; ФК 01
ПРН05	Вміти формулювати наукові гіпотези, мету і завдання наукового дослідження.	ЗК 02; ФК 01,
ПРН06	Вміти розробляти дизайн та план наукового дослідження.	ЗК 02 ФК 01
ПРН07	Вміти виконувати оригінальне наукове дослідження.	ФК 01
ПРН08	Вміти проводити аналіз, систематизацію й інтерпретацію результатів наукових досліджень, використовувати методи статистичної обробки даних	ФК 01
ПРН09	Вміти пояснювати принципи, специфічність і чутливість методів дослідження, інформативність обраних показників	ЗК 01; ФК 01, ФК 02
ПРН11	Вміти інтерпретувати та аналізувати інформацію з використанням новітніх інформаційних технологій.	ЗК 02, 03; ФК 01

### ІНФОРМАЦІЙНИЙ ОБСЯГ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

На вивчення навчальної дисципліни відводиться 3,0 кредитів ЄКТС, 90 годин.

**Тема 1.** In silico підходи при пошуку біологічно активних речовин – потенційних лікарських засобів (історичні аспекти, успіхи та досягнення, роль та значення в етапах «від молекули до препарату»).

**Тема 2.** Основні стратегії *drug design* (конструювання ліків).

**Тема 3.** Молекулярні дескриптори, їх класифікація, характеристика, розрахунок.

**Тема 4.** Докінгові дослідження.

**Тема 5.** Зв'язок структура-активність: SAR, QSAR

**Тема 6.** Програмні пакети представлення структури молекул

**Тема 7.** Характеристика методів квантової хімії.

**Тема 8.** Прогнозування фармакологічної активності, можливих метаболітів, фармакокінетичних параметрів молекул БАР.

**Тема 9.** Віртуальний скринінг (принципи, підходи та алгоритми, програмні пакети).

**Тема 10.** Використання *drug design* (ліганд-, мішень-орієнтований, «fragment-based», «structure-based» дизайн).

**Тема 11.** Фармакофорне моделювання (принципи, алгоритми, програмні пакети).

**Тема 12.** QSAR-моделі (побудова, статистичні характеристики, прогнозування параметру активності).

**Тема 13.** Сполуки-хіти, структури-лідери та їх оптимізація.

## НАВЧАЛЬНИЙ ПЛАН

### з дисципліни

### «*In silico* підходи при пошуку біологічно активних речовин – потенційних лікарських засобів»

№ п.п.	Тема	Кількість кредитів, годин, з них			
		Лекцій	Семінари	Самостійна робота	Разом
1.	<i>In silico</i> підходи при пошуку біологічно активних речовин – потенційних лікарських засобів (історичні аспекти, успіхи та досягнення, роль та значення в етапах «від молекули до препарату»)	2	3	3	6
2.	Основні стратегії <i>drug design</i> (конструювання ліків)	2	3	3	4
3.	Молекулярні дескриптори, їх класифікація, характеристика, розрахунок.	2	3	3	4
4.	Докінгові дослідження.	2	3	3	4
5.	Зв'язок структура-активність: SAR, QSAR	2	3	3	4
6.	Програмні пакети представлення структури молекул		3	3	4
7.	Характеристика методів квантової хімії	-	3	4	4
8.	Прогнозування фармакологічної активності, можливих метаболітів, фармакокінетичних параметрів молекул БАР		3	3	
9.	Віртуальний скринінг (принципи, підходи та алгоритми, програмні пакети).		3	4	
10.	Використання <i>drug design</i> (ліганд-, мішень-орієнтований, «fragment-based», «structure-based» дизайн).		3	4	
11.	Фармакофорне моделювання (принципи, алгоритми, програмні пакети).		3	3	
12.	QSAR-моделі (побудова, статистичні характеристики, прогнозування параметру активності).		3	3	
13.	Сполуки-хіти, структури-лідери та їх оптимізація.		2	3	
1	<b>Всього</b>	10	38	42	90



### ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ

№ п.п.	Тема	Кількість годин
1.	<i>In silico</i> підходи при пошуку біологічно активних речовин – потенційних лікарських засобів (історичні аспекти, успіхи та досягнення, роль та значення в етапах «від молекули до препарату»)	2
2	Основні стратегії <i>drug design</i> (конструювання ліків)	2
3	Молекулярні дескриптори, їх класифікація, характеристика, розрахунок.	2
4	Докінгові дослідження.	2
5	Зв'язок структура-активність: SAR, QSAR	2
	<b>Всього</b>	10

### ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН СЕМІНАРІВ

№ п.п.	Тема	Кількість годин
1.	<i>In silico</i> підходи при пошуку біологічно активних речовин – потенційних лікарських засобів (історичні аспекти, успіхи та досягнення, роль та значення в етапах «від молекули до препарату»)	3
2.	Основні стратегії <i>drug design</i> (конструювання ліків)	3
3.	Молекулярні дескриптори, їх класифікація, характеристика, розрахунок.	3
4.	Докінгові дослідження.	3
5.	Зв'язок структура-активність: SAR, QSAR	3
6.	Програмні пакети представлення структури молекул	3
7.	Характеристика методів квантової хімії	3
8	Прогнозування фармакологічної активності, можливих метаболітів, фармакокінетичних параметрів молекул БАР	3
9	Віртуальний скринінг (принципи, підходи та алгоритми, програмні пакети).	3
10	Використання <i>drug design</i> (ліганд-, мішень-орієнтований, «fragment-based», «structure-based» дизайн).	3
11	Фармакофорне моделювання (принципи, алгоритми, програмні пакети).	3
12	QSAR-моделі (побудова, статистичні характеристики, прогнозування параметру активності).	3
13	Сполуки-хіти, структури-лідери та їх оптимізація.	2
	<b>Всього</b>	38

**Верифікація результатів навчання** відповідно до Положення «Критерії, правила і процедури оцінювання результатів навчальної діяльності аспірантів та здобувачів за третім (освітньо-науковим) рівнем вищої освіти у ЛНМУ імені Данила Галицького»

**Видами навчальної діяльності аспірантів** згідно з навчальним планом є:

а) лекції,

- б) семінарські заняття,
- в) самостійна робота аспірантів (СРА).

Семінарські заняття передбачають: опанування принципів побудови експерименту чи клінічного дослідження; визначення джерел біологічного матеріалу, зокрема можливості використання архівних, колекційних матеріалів; визначення релевантних методів для аналізу завдань дисертаційної роботи; визначення критерії біобезпеки при виконання дисертаційної роботи; визначення необхідності використання тварин у експериментальній роботі дисертаційного дослідження, визначення шляхів планування експерименту з використанням критерії наукової цінності, відтворюваності та гуманності; створення профілю в безкоштовному ресурсі-надавачі послуг бібліографічного ПЗ: створення бази цитувань за темою дисертаційної роботи; використання баз бібліографічних посилань для написання дисертаційної роботи, статей та тез; ознайомлення з нормативно-правовими документами, які регламентують роботу разових спеціалізованих вчених рад; знання вимог до публікацій результатів дисертаційних робіт на здобуття ступеня доктора філософії; ознайомлення з правилами оформлення дисертації та документів атестаційної справи.

**Поточний контроль** здійснюється під час проведення практичних занять і має на меті перевірку засвоєння аспірантами навчального матеріалу. Формами поточного контролю є:

- а) тестові завдання з вибором однієї правильної відповіді, з визначенням правильної послідовності дій, з визначенням відповідності, з визначенням певної ділянки на фотографії чи схемі («розпізнавання»);
- б) індивідуальне усне опитування, співбесіда;
- в) розв'язання типових ситуаційних задач;
- д) контроль практичних навичок;

Комплексне оцінювання навчальної діяльності здійснюється виставлення традиційної оцінки, яка конвертується у бали відповідно у кожному з занять, аспірант отримує на практичному занятті: оцінку «5» - якщо він виконав правильно не менше 90% навчальних завдань; оцінку «4» - якщо він виконав правильно не менше 80% навчальних завдань; оцінку «3» - якщо він виконав правильно не менше 60% навчальних завдань; оцінку «2» - якщо він виконав правильно менше 60% навчальних завдань; На кінцевому етапі заняття викладач виставляє набрану суму балів і традиційну оцінку в журналі успішності.

**Самостійна робота** аспіранта оцінюється на практичних заняттях і є складовою підсумкової оцінки аспіранта.

#### **Підсумковий контроль**

Загальна система оцінювання проводиться по завершенню вивчення дисципліни у вигляді заліку.

Шкали оцінювання традиційна 4-бальна шкала, багатобальна (200-бальна) шкала, рейтингова шкала ECTS

**Залік** – це форма підсумкового контролю засвоєння аспірантом теоретичного та практичного матеріалу з навчальної дисципліни. Підсумковий контроль проводиться у письмовій формі, відповідно до розкладу. Триває 2 академічних години.

**Максимальна кількість балів**, яку може набрати аспірант за поточну навчальну діяльність для допуску до заліку становить 200 балів.

**Мінімальна кількість балів**, яку повинен набрати аспірант за поточну навчальну діяльність для опуску до заліку становить 120 бали.

**Розрахунок кількості балів** проводиться на підставі отриманих аспірантом оцінок за 4-ри бальною (національною) шкалою під час вивчення дисципліни, шляхом обчислення середнього арифметичного (СА), округленого до двох знаків після коми. Отримана величина конвертується у бали за багатобальною шкалою таким чином:

$$x = \frac{CA \times 200}{5}$$

Для зручності наведено таблицю перерахунку за 200-бальною шкалою:  
Перерахунок середньої оцінки за поточну діяльність у багатобальну шкалу для дисциплін, що завершуються заліком

4	200	4	200	4	200	4	200	4	200
бальна	бальна	бальна	бальна	бальна	бальна	бальна	бальна	бальна	бальна
шкала	шкала	шкала	шкала	шкала	шкала	шкала	шкала	шкала	шкала
5	200	4,6	184	4,17	167	3,77	151	3,35	134
4,97	199	4,57	183	4,14	166	3,74	150	3,32	133
4,95	198	4,52	182	4,12	165	3,72	149	3,3	132
4,92	197	4,5	180	4,09	164	3,7	148	3,27	131
4,9	196	4,47	179	4,07	163	3,67	147	3,25	130
4,87	195	4,45	178	4,04	162	3,65	146	3,22	129
4,85	194	4,42	177	4,02	161	3,62	145	3,2	128
4,82	193	4,4	176	3,99	160	3,57	143	3,17	127
7,8	192	4,37	175	3,97	159	3,55	142	3,15	126
4,77	191	4,35	174	3,94	158	3,52	141	3,12	125
4,75	190	4,32	173	3,92	157	3,5	140	3,1	124
4,72	189	4,3	172	3,89	156	3,47	139	3,07	123
4,7	188	4,27	171	3,87	155	3,45	138	3,02	121
4,67	187	4,24	170	3,84	154	3,42	137	3	120
4,65	186	4,22	169	3,82	153	3,4	136	Менше 3	Недоста
4,62	185	4,19	168	3,79	152	3,37	135	тньо	

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

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

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

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

### Контрольні запитання

1. In silico підходи при пошуку біологічно активних речовин – потенційних лікарських засобів (роль та значення в етапах «від молекули до препарату»)
2. Лікарські засоби створені за допомогою In silico підходів.
3. Основні стратегії drug design (конструювання ліків)
4. Молекулярні дескриптори, їх класифікація, характеристика, розрахунок.
5. Докінгові дослідження.
6. Зв'язок структура-активність: SAR, QSAR
7. Програмні пакети представлення структури молекул
8. Характеристика методів квантової хімії

9. Прогнозування фармакологічної активності, можливих метаболітів, фармакокінетичних параметрів молекул БАР
10. Віртуальний скринінг (принципи, підходи та алгоритми, програмні пакети).
11. Використання drug design (ліганд-, мішень-орієнтований, «fragment-based», «structure-based» дизайн).
12. Фармакофорне моделювання (принципи, алгоритми, програмні пакети).
13. QSAR-моделі (побудова, статистичні характеристики, прогнозування параметру активності).
14. Сполуки-хіти, структури-лідери та їх оптимізація.

### **Рекомендована література**

1. Foye's Principles of Medicinal Chemistry, 76th ed, edited by Thomas L. Lemke, David A. Williams.2019.1500p.
2. In Silico Drug Design: Repurposing Techniques and Methodologies Edition by Kunal Roy (Editor)/ 2019.886p.
- Sean Ekins. Computer applications in pharmaceutical research and development. Wiley.2006.806 p.
3. Bultinck P., De Winter H., Langenaeker W., Tollenaere J.P. Computational Medicinal Chemistry for Drug Discovery. New York.Marcel Dekker Inc.2004. 684p.
4. Patric G.L. An introduction to medicinal chemistry 6th ed. Oxford, New York, Tokyo, Oxford University Press.2017. 912p.
5. Alvarez J., Shoichet B. Virtual screening in drug discovery. BocaRaton, London, New York, Singapore. Taylor & Francis. 2005. 451p.
6. Todeschini R, Consonni V. Molecular Descriptors for Chemoinformatic (2 volumes).Weinheim.: WILEY-VCH, 2009. 1257p.
7. In Silico Approaches in Drug Design Edited by Osvaldo Andrade Santos-Filho. 2022.754p.
8. In Silico Drug Discovery and Design Theory, Methods, Challenges, and Applications1st Edition Edited By Claudio N. Cavasotto. 2017.560p.