

СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Технології in silico розробки активних фармацевтичних інгредієнтів

Статус дисципліни – вільного вибору здобувача вищої освіти.

Викладач: Бессарабов В.І., доцент кафедри промислової фармації.

Рекомендовано третій (освітньо-науковий) рівень вищої освіти.

Необхідні навчальні компоненти (пререквізити): технології активних фармацевтичних інгредієнтів, методологія сучасних наукових досліджень з основами інтелектуальної власності.

1. Анотація курсу

Обсяг модуля: загальна кількість годин – 120, з них: лекції – 10 год., практичні – 20 год., самостійна робота – 90 год.; кількість кредитів ЄКТС – 4.

Мета курсу – набуття професійної компетентності у розробці активних фармацевтичних інгредієнтів шляхом застосування технологій in silico в дослідженні закономірностей взаємозв'язку між структурою хімічних молекул та їх біологічною і, відповідно, потенційною фармакологічною активністю; дослідженні нових властивостей відомих АФІ та розробці дизайну віртуального фармакологічного експерименту.

Результати навчання дисципліни:

знати: сучасну термінологію в області пошуку нових біологічно активних сполук; основні джерела пошуку та методів обробки інформації щодо хімічних та біологічних властивостей нових потенційно активних сполук; методи прогнозування біологічної активності хімічних сполук різних класів; підходи до раціонального поєднання результатів методів хемоінформатики та експериментальних досліджень;

вміти: інтерпретувати результати досліджень; обирати, обґрунтовувати та використовувати новітні інформаційні та комунікаційні технології в наукових дослідженнях; орієнтуватися у сучасних хімічних базах даних та використовувати їх у віртуальних та експериментальних дослідженнях; формувати висновки та створювати нові знання з використанням інформаційних технологій та експериментальних результатів у власних наукових дослідженнях;

здатен продемонструвати: знання in silico методології спрямованого пошуку біологічно активних сполук (структурна подібність, молекулярний докінг, комп'ютерний прогноз біологічної активності (PASS), взаємозв'язки «будова-дія» (SAR-, QSAR-методи); оволодіння сучасними технологіями розробки дизайну віртуального фармакологічного експерименту;

володіти навичками: використання методології in silico у віртуальних та експериментальних дослідженнях у розробці та дослідженні нових АФІ і плейотропних ефектів у відомих АФІ, фармацевтичній розробці нових лікарських препаратів;

самостійно вирішувати: актуальні наукові проблеми, визначати цілі та завдання досліджень та обґрунтовувати їх результати, формулювати авторські висновки і пропозиції.

Зміст дисципліни: Тема 1. Основні поняття і теоретичні основи хемоінформатики. Тема 2. QSAR методологія пошуку кількісних взаємозв'язків біологічної активності речовин із їх хімічною структурою. Конструювання молекулярних структур із заданими властивостями. Тема 3. Молекулярний докінг-аналіз просторової структури ліганд-рецепторного комплексу. Області використання молекулярного докінгу.

Форма підсумкового контролю: екзамен.

Засоби діагностики успішності навчання: індивідуальні завдання, презентації, практичні роботи, тести, питання для модульного та підсумкового контролів.

Мова навчання: українська.

2. Оцінювання

Розподіл балів, які отримують здобувачі вищої освіти

Поточне оцінювання та самостійна робота			МК	Екзамен	Сума
T1	T2	T3			
20	30	30	10	10	100

Розподіл балів з дисципліни

Види робіт, що оцінюються в балах	T1	T2	T3	Усього
Виконання і захист практичної роботи	16	24	24	64
Презентації	4	6	6	16
Модульний контроль	10			10
Екзамен	10			10
Всього з дисципліни				100

Критерії оцінювання екзамену

Завдання екзаменаційного білету	Шкала оцінювання, бали	Критерії оцінювання
Питання 1	4	В повному обсязі володіє тематикою, всебічно розкриває зміст поставленого питання та надає обґрунтовані висновки.
	3	В повному обсязі володіє навчальним матеріалом і розкриває зміст поставленого питання.
	2	Достатньо повно володіє матеріалом, ґрунтовно його викладає, але допускає незначні помилки
	1	В цілому володіє навчальним матеріалом, викладає лише його основний зміст
	0	Не володіє навчальним матеріалом та не в змозі його викласти, не розуміє змісту питання
Питання 2	3	В повному обсязі володіє навчальним матеріалом, всебічно розкриває зміст поставленого питання
	2	Достатньо повно володіє матеріалом, ґрунтовно його викладає, але допускає незначні помилки
	1	В цілому володіє навчальним матеріалом, викладає лише його основний зміст
	0	Не володіє навчальним матеріалом та не в змозі його викласти, не розуміє змісту питання
Питання 3	3	В повному обсязі володіє навчальним матеріалом, всебічно розкриває зміст поставленого питання
	2	Достатньо повно володіє матеріалом, ґрунтовно його викладає, але допускає незначні помилки
	1	В цілому володіє навчальним матеріалом, викладає лише його основний зміст
	0	Не володіє навчальним матеріалом та не в змозі його викласти, не розуміє змісту питання

Якщо здобувач вищої освіти на екзамені отримав менше 3 балів, виставляється оцінка «незадовільно». В разі не підтвердження на екзамені оцінки, що здобувач вищої освіти отримав впродовж семестру за всі види навчальної діяльності, оцінка підсумкового контролю виставляється за результатами складеного екзамену.

Відповідність шкал оцінок якості засвоєння навчального матеріалу

Оцінка за національною шкалою для екзамену, КП, КР /заліку/	Оцінка в балах	Оцінка за шкалою ECTS	Пояснення
Відмінно/зараховано	90-100	A	Відмінно (відмінне виконання лише з незначною кількістю помилок)
Добре/зараховано	82-89	B	Дуже добре (вище середнього рівня з кількома помилками)
	74-81	C	Добре (в загальному вірне виконання з певною кількістю суттєвих помилок)
Задовільно/зараховано	64-73	D	Задовільно (непогано, але зі значною кількістю недоліків)
	60-63	E	Достатньо (виконання відповідає мінімальним критеріям)
Незадовільно/незараховано	35-59	FX	Незадовільно (з можливістю повторного складання)
	0-34	F	Незадовільно (з обов'язковим повторним вивченням дисципліни)

3. Політика курсу:

3.1 Обов'язкове дотримання академічної доброчесності здобувачами вищої освіти, а саме: самостійне виконання навчальних завдань модульного та підсумкового контролів без використання зовнішніх джерел інформації (телефонів, смартфонів, планшетів та інших гаджетів); мобільні пристрої дозволяється використовувати лише під час онлайн тестування та виконання розрахунків на практичних роботах;

- самостійний аналіз власних фізіологічних/психологічних показників під час виконання практичних робіт;

- обов'язкове посилення на джерела інформації у разі використання ідей, розробок, тверджень, відомостей;

- дотримання норм законодавства про авторське право і суміжні права.

3.2 Для отримання позитивної оцінки з дисципліни необхідно виконати на мінімально допустимий бал всі види робіт, передбачені робочою програмою курсу; роботи повинні бути виконані в строк, відповідно до розкладу занять.

Перенесення терміну здачі робіт/перездача: роботи, які здаються із порушенням термінів без поважних причин (лікарняний, академічна мобільність, інші підтвержені складні обставини), оцінюються на нижчу оцінку (75% від можливої максимальної кількості балів за вид діяльності балів).

3.3 Присутність на занятті здобувачів вищої освіти є обов'язковим компонентом оцінювання. За об'єктивних причин (наприклад, хвороба, складні сімейні обставини) заняття може бути пропущене за умови обов'язкового відпрацювання. Перескладання модульного контролю відбувається за наявності поважних причин (наприклад, лікарняний або академічна мобільність).

3.4. При виявленні плагіату, або використанні не своїх даних, робота вважається невиконаною і, відповідно, не оцінюється.