

СИЛАБУС ОСВІТНЬОЇ КОМПОНЕНТИ

Молекулярний дизайн потенційних АФІ

(назва освітньої компоненти)

освітньої-наукової програми «Фармація PhD»

(назва освітньої програми)

спеціальності 226 Фармація, Промислова фармація Фрhd(4,0д), Фрhd(4,0в), Фрhd(4,0з)

(шифр, назва спеціальності)

галузі знань «22 Охорона здоров'я»

(шифр, назва галузі знань)

третього освітньо-наукового рівня вищої освіти

(назва рівня вищої освіти)

ВИКЛАДАЧІ



Перехода Ліна Олексіївна lina.perekhoda@nuph.edu.ua



Зубков Вадим Олексійович vadim.zubkov@nuph.edu.ua



Судейман Маргарита
Мохеддінівна suleiman.nfau@outlook.com

1. Назва закладу вищої освіти та підрозділу: Національний фармацевтичний університет, кафедра медичної хімії.

2. Адреса: м. Харків, вул. Валентинівська, 4, 3-й поверх, т. 057-67-31-41.

3. Веб-сайт: <http://medchem.nuph.edu.ua/>

4. Інформація про викладачів:

Перехода Ліна Олексіївна

Доктор фармацевтичних наук, професор, завідувачка кафедри медичної хімії Національного фармацевтичного університету. Досвід наукової діяльності – 25 років, досвід науково-педагогічної діяльності – 22 роки. Читає курси: «Фармацевтична хімія», «Стандартизація лікарських засобів», «Фізико-хімічні фактори дії ліків», «Молекулярний дизайн потенційних АФІ». Наукові інтереси: молекулярний докінг, синтез, QSAR-аналіз.

Зубков Вадим Олексійович

Доктор фармацевтичних наук, доцент, доцент ЗВО кафедри медичної хімії Національного фармацевтичного університету. Досвід наукової діяльності – 29 років, досвід науково-педагогічної діяльності – 25 років. Читає курси: «Фармацевтична хімія», «Стандартизація лікарських засобів». Наукові інтереси: розробка та оптимізація методів синтезу нових БАР гетероциклічної природи; раціональний дизайн структур БАР на основі даних віртуального скринінгу та комп'ютерних розрахунків прогнозу біологічної активності з метою створення нових оригінальних та високоефективних лікарських препаратів.

Сулейман Маргарита Мохеддінівна

Кандидат фармацевтичних наук, доцент, доцент ЗВО кафедри медичної хімії Національного фармацевтичного університету. Досвід наукової діяльності – 14 років, досвід науково-педагогічної діяльності – 8 років. Читає курси: «Фармацевтична хімія», «Стандартизація лікарських засобів». Наукові інтереси: синтез, молекулярний докінг, QSAR-аналіз.

5. Консультації: відбуваються під час вивчення освітньої компоненти онлайн кожного вівторка о 12-00 годині. Консультації проводить доцент Зубков В.О.

(<https://us04web.zoom.us/j/9175385327?pwd=MFdJb21hejE4N2ljSWxVV0gzdkZ5UT09>)

ідентифікатор: 9175385327, пароль: 679542)

6. Анотація освітньої компоненти: освітня компонента «Молекулярний дизайн потенційних АФІ» є вибірковою дисципліною для освітньо-наукового рівня вищої освіти доктора філософії «226 Фармація, промислова фармація», освітня програма «Фармація», PhD». Семестровий контроль – залік.

7. Мета освітньої компоненти: Мета освітньої компоненти «Молекулярний дизайн потенційних АФІ» полягає в освоєнні теоретичних основ методів комп'ютерного молекулярного моделювання та практичному їх використанні для оптимізації експериментального пошуку нових потенційних біологічно активних речовин з прогнозованими видами біологічної активності.

8. Компетентності відповідно до освітньої програми:**Фахові (спеціальні) компетентності (ФК):**

ФК 2. Здатність виконувати оригінальні наукові дослідження в галузі фармації, які дозволяють створювати інноваційні продукти та формують знання, що мають теоретичне і прикладне значення для фармації та медицини в цілому.

ФК 3. Здатність використовувати інформаційно-комунікативні технології для збору/одержання, аналізу, систематизації та обробки даних під час здійснення наукових досліджень та освітньої діяльності у сфері фармації.

ФК 5. Здатність використовувати одержані в ході наукових досліджень результати та знання для синтезу нових ідей, визначення нових цілей та перспектив розвитку фармацевтичної науки та галузі в цілому.

9. Програмні результати навчання:

Інтегративні кінцеві *програмні результати навчання (ПРН)*, формуванню яких сприяє освітня компонента:

ПРН 1. Мати передові концептуальні та методологічні знання з фармації і на межі предметних галузей, а також дослідницькі навички, достатні для проведення наукових і прикладних досліджень на рівні останніх світових досягнень з відповідного напрямку, отримання нових знань та/або здійснення інновацій.

ПРН 3. Формулювати і перевіряти гіпотези; використовувати для обґрунтування висновків належні докази, зокрема, результати теоретичного аналізу, експериментальних досліджень (опитувань, спостережень, моніторингу тощо) і математичного та/або комп'ютерного моделювання, наявні літературні дані.

ПРН 4. Розробляти та досліджувати концептуальні, математичні і комп'ютерні моделі процесів і систем, ефективно використовувати їх для отримання нових знань та/або створення інноваційних продуктів у фармації та дотичних міждисциплінарних напрямках.

ПРН 6. Застосовувати сучасні інструменти і технології пошуку, обробки та аналізу інформації, зокрема, статистичні методи аналізу даних великого обсягу та/або складної структури, спеціалізовані бази даних та інформаційні системи.

10. Статус освітньої компоненти: Вибіркова.

11. Пререквізити освітньої компоненти: «Органічна хімія» «Фармацевтична хімія», «Медична хімія», «Фармакоінформатика».

12. Обсяг освітньої компоненти: 3 кредити ЕКТС, 90 годин:

Денна форма – 40 год аудиторних занять, з них – 8 годин лекцій, 32 години практичних занять, 50 годин самостійної роботи;

Вечірня форма – 40 год аудиторних занять, з них – 8 годин лекцій, 32 години практичних занять, 50 годин самостійної роботи.

13 Організація навчання:

Формат викладання освітньої компоненти:

Зміст освітньої компоненти:

Модуль 1. Сучасні підходи до дизайну нових АФІ. Хемоінформатика як основний інструмент молекулярного дизайну потенційних біологічно активних речовин. Загальні принципи, підходи, алгоритми, та програмне забезпечення, що використовуються в хемоінформатиці

Тема 1. Введення в хемоінформатику. Роль комп'ютерних технологій в процесах пошуку і створення нових лікарських препаратів. Комп'ютерні ОС, ліцензування та використання їх у наукових роботах. Огляд хімічних платформ Biovia, Chemoffice, ACD labs, ChemAxone. Огляд офісних програм.

Тема 2. Види представлення хімічних об'єктів. Особливості представлення в хемоінформатиці. Лінійні представлення (імена, SMILES, InChI). Подання молекулярних графів. Бітові рядки (структурні ключі, відбитки пальців, хешіровані відбитки пальців).

Тема 3. Види представлення хімічних об'єктів. Матричне подання. Тривимірні подання. Поверхні. Види поверхонь. Структури Маркуша. Типові формати файлів (MDL, Sybyl, PDB). Конвертація між поданнями хімічних об'єктів.

Тема 4. Хімічні бази даних. Типи баз і особливості роботи з ними. Види пошуку у хімічних базах даних. Пошук за структурою, підструктурою, суперструктурою і за молекулярною подібністю. Основні алгоритми пошуку. Знайомство з базами PubChem, ChemBl, Zinc та ін. **Контроль змістового модулю 1.**

Модуль 2. Хімічний простір і віртуальний скринінг. Методи молекулярного дизайну, що базуються на основі хімічних структур і на основі білкових мішеней. In silico методи оптимізації «структур-лідерів»

Тема 5. Хемоінформаційні дескриптори. Різноманіття і класифікація дескрипторів за їх функціональністю. Методи розрахунків і використання дескрипторів у віртуальному скринінгу. Фізико-хімічні дескриптори. Топологічні індекси. Тривимірні, фрагментні та фармакофорні дескриптори. Дескриптори молекулярних полів і молекулярної подібності.

Тема 6. Моделювання "структура-активність" і "структура-властивість". Історія моделювання SAR/QSAR/QSPR. Інтелектуальний аналіз даних у хемоінформатиці.

Тема 7. Класичний QSAR (методи Ганча, Фрі-Вільсона). SAR/QSAR/QSPR на дескрипторах. 3D QSAR моделювання. Завдання та методи машинного навчання. Інтелектуальні нейронні мережі.

Тема 8. Віртуальний скринінг. Характеристика структурного методу і методу, що заснований на використанні білкових мішеней. Визначення хітів, оптимізація «структур-лідерів». Застосування методів молекулярного докінгу та молекулярної динаміки у віртуальному скринінгу. Програми для молекулярного докінгу. **Контроль змістового модулю 2.**

14. Види та форми контролю:

Поточний контроль: індивідуальне опитування, співбесіда, складання тестових завдань – рішення відповідних практичних завдань, написання алгоритмів, інтерпретація отриманих результатів, індивідуальний контроль практичних дій.

Форма семестрового контролю: семестровий залік.

15. Система оцінювання з освітньої компоненти:

Результати семестрового контролю у формі семестрового заліку оцінюються за 100-бальною, недиференційованою шкалою («зараховано», «не зараховано») та за шкалою ECTS.

Бали з освітньої компоненти нараховуються за таким співвідношенням:

Види оцінювання	Максимальна кількість балів (% від кількості балів за модуль – для змістових модулів)
Змістовий модуль 1 - оцінювання тем 1-4: – усне опитування, – виконання практичного завдання, – вирішення ситуаційно-розрахункових задач, – складання тестових завдань.	50 (50 %)
Змістовий модуль 2 - оцінювання тем 5-8: – усне опитування, – виконання практичного завдання, – вирішення ситуаційно-розрахункових задач, – складання тестових завдань.	50 (50 %)
Семестровий контроль з модуля	100

Самостійна робота здобувачів вищої освіти оцінюється під час поточного контролю.

16. Політики освітньої компоненти:

Політика щодо академічної доброчесності. Ґрунтується на засадах академічної доброчесності, наведених в ПОЛ «Про заходи щодо запобігання випадків академічного плагіату у НФаУ». Списування при оцінюванні успішності здобувача вищої освіти під час контрольних заходів на практичних заняттях заборонені (в т.ч. із використанням мобільних девайсів). Виявлення ознак академічної недоброчесності в письмовій роботі здобувача освіти є підставою для її незарахування викладачем.

Політика щодо відвідування занять. Здобувач вищої освіти зобов'язаний відвідувати навчальні заняття (ПОЛ «Про організацію освітнього процесу НФаУ») згідно з розкладом (<https://nuph.edu.ua/rozklad-zanyat/>), дотримуватися етичних норм поведінки.

Політика щодо дедайнів, відпрацювання, підвищення рейтингу, ліквідації академічної заборгованості. Відпрацювання пропущених занять здобувачем вищої освіти здійснюється відповідно до ПОЛ «Положення про відпрацювання студентами пропущених навчальних занять та порядок ліквідації академічної різниці в навчальних планах у НФаУ» згідно з встановленим на

кафедрі графіком відпрацювань пропущених занять. Підвищення рейтингу та ліквідація академічної заборгованості з освітньої компоненти здійснюється здобувачами освіти відповідно до порядку, наведеного в ПОЛ «Про порядок оцінювання результатів навчання здобувачів вищої освіти у НФаУ». Здобувачі вищої освіти зобов'язані дотримуватися усіх строків, визначених кафедрою для виконання видів письмових робіт з освітньої компоненти. Роботи, які здаються із порушенням термінів без поважних причин, оцінюються на нижчу оцінку – до 20% від максимальної кількості балів за даний вид роботи.

Політика щодо оскарження оцінки з освітньої компоненти (апеляцій). Здобувачі вищої освіти мають право на оскарження (апеляцію) оцінки з освітньої компоненти, отриманої під час контрольних заходів. Апеляція здійснюється відповідно до ПОЛ «Положення про оскарження результатів семестрового контролю знань здобувачів вищої освіти у НФаУ».

17. Інформаційне та навчально-методичне забезпечення дисципліни:

Обов'язкова література

1. Державна Фармакопея України : в 3 т. / ДП Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів". – 2-е вид. – Х. : Державне підприємство "Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів", 2015. – Т. 1. – 1128 с.
2. Державна Фармакопея України : в 3 т. / ДП Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів". – 2-е вид. – Х. : Державне підприємство "Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів", 2014. – Т. 2. – 724 с.
3. Державна Фармакопея України : в 3 т. / ДП Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів". – 2-е вид. – Х. : Державне підприємство "Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів", 2014. – Т. 3. – 732 с.
4. The European Pharmacopoeia. 8th edition. – Published by the Directorate for the Quality of Medicines & Healthcare of the Council of Europe. – Council of Europe, 67075 Strasbourg Cedex, France. – 2013.
5. Інформатика і комп'ютерна техніка. Комп'ютерні технології: Підручник для студентів вищих навчальних закладів (За ред. О.І. Пушкаря. К.: Видавничий центр "Академія", 2002. – 704 с. (Серія Альма-матер).

Додаткова література для поглибленого вивчення освітньої компоненти

1. Build QSAR: A New Computer Program for QSAR Analysis. Quant. Struct /De Oliveira, D.B.; Gaudio, A. C.// *Activ. Relat.* – 2001. – Vol. 19, № (6) – P. 599–601.
2. Орлов В.Д., Липсон В.В., Иванов В.В., Медицинская химия. М.: Фолио, 2005. - 461с.
3. Foye's principles of medicinal chemistry/ David A. Williams, Thomas L. – 5th ed. 2002.
4. А. Кучер, Н. Гарбер, М.Баран. Світові медичні ресурси Інтернету (довідник). Київ. Здоров'я. 2003.- 336 с
5. Gareth T. Medicinal chemistry. An introduction – London: John Wiley & Sons Inc., 2000. – 540 p.

Актуальні електронні інформаційні ресурси (журнали, сайти тощо) для поглибленого вивчення освітньої компоненти

1. Сайт кафедри медичної хімії: <http://medchem.nuph.edu.ua/>
2. Сайт Центру дистанційних технологій НФаУ: pharmel.kharkiv.edu
3. Сайт наукової бібліотеки НФаУ: <http://lib.nuph.edu.ua>
4. Електронний архів Національного фармацевтичного університету <http://dspace.nuph.edu.ua>
5. Нормативно-директивні документи МОЗ України <https://mozdocs.kiev.ua/liki.php>
6. Інформаційно-пошукова система «Компендіум – лікарські препарати»
7. Інформаційно-пошукова система DrugBank онлайн
8. Інформаційно-пошукова система <https://www.drugs.com/>
9. Todeschini R., Consonni V. Molecular Descriptors for Chemoinformatics; Weinheim(Germany),Wiley –VCH. 2009.–1257 p.[Електронний ресурс]. –Режим доступу: http://www.taletе.mi.it/products/dragon_molecular_descriptor_list.pdf
10. Інформаційно-пошукова система RCSB Protein Data Bank (RCSB PDB)

Система дистанційного навчання Moodle

Сайт Центру дистанційних технологій НФаУ: pharmel.kharkiv.edu (матеріали для самостійної роботи кафедри медичної хімії <https://pharmel.kharkiv.edu/moodle/course/index.php?categoryid=175>)

18. Технічне й програмне забезпечення освітньої компоненти: персональні комп'ютери з операційною системою Windows 10/11 або Linux, що мають доступ до мережі Інтернет, пристрій мультимедійний, екран.