

СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
Технології in silico розробки активних фармацевтичних інгредієнтів

Статус дисципліни – вільного вибору здобувача вищої освіти.

Викладачі кафедри промислової фармації: Бессарабов В.І., професор.

Рекомендовано – третій (освітньо-науковий) рівень вищої освіти.

Необхідні навчальні компоненти (пререквізити): технології активних фармацевтичних інгредієнтів, теорія явищ і процесів; теорія інноваційних технологій фармацевтичних препаратів, іноземна мова для академічних цілей, інформаційно-комунікаційні технології в наукових дослідженнях.

1. Анотація курсу:

Обсяг модуля: загальна кількість годин – 120 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 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 засобів;

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. Технології in silico у пошуку кількісних взаємозв'язків біологічної активності сполук з їх хімічною структурою. Тема 3. Молекулярний докінг у розробці та дослідженні активних фармацевтичних інгредієнтів.

Форма підсумкового контролю: залік.

Засоби діагностики успішності навчання: індивідуальні завдання, а саме презентації, практичні роботи, тести, питання для модульного контролю.

Мова навчання: українська, англійська.

2. Оцінювання:

Розподіл балів, які отримують здобувачі вищої освіти

Поточне оцінювання та самостійна робота			МК	Сума
T1	T2	T3		
30	30	30		

Розподіл балів з дисципліни

Види робіт, що оцінюються в балах	T1	T2	T3	Усього
Виконання і захист практичної роботи	24	24	24	72
Презентації	6	6	6	18
Модульний контроль	10			10
Всього з дисципліни				100

Критерії оцінювання видів робіт

Критерії оцінювання практичної роботи: виконання практичної роботи 10 балів, оформлення протоколу практичної роботи, висновки, контрольні питання - 10 балів, захист практичної роботи - 4 бали.

Критерії оцінювання презентації (наявність чіткої структури, повнота розкриття теми) - 6 балів.

Модульний контроль оцінюється до 10 балів.

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/ не зараховано	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 всіх видів робіт, завдань, форм контролю, передбачених робочою програмою даної навчальної дисципліни;
 - посилання на джерела інформації у разі використання ідей, розробок, тверджень, відомостей;
 - дотримання норм законодавства про авторське право і суміжні права;
 - надання достовірної інформації про результати власної навчальної (наукової, творчої) діяльності, використанні методики досліджень і джерела інформації.
- 3.2 Допускається визнання результатів навчання, отриманих у неформальній освіті .
- 3.3 Отримання мінімальної оцінки з дисципліни можливе за умови виконання практичних робіт і презентацій в повному обсязі і складений всі види контролю за кожною темою.
- 3.4 Перенесення терміну здачі робіт/перездача:
- роботи, які здаються із порушенням термінів без поважних причин (лікарняний, академічна мобільність, оцінюються на нижчу оцінку (75% від можливої максимальної кількості балів за вид діяльності балів) ;
 - роботи, які здаються із порушенням термінів з поважних причин (лікарняний, академічна мобільність, інші підтверджені складні обставини тощо), оцінюються за результатами виконання практичних робіт і презентацій в повному обсязі і всіх видів контролю за кожною темою.
- 3.5 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 модульних/тематичних/поточних контролів відбувається за наявності поважних причин (наприклад, лікарняний або академічна мобільність).
- 3.6 При виявленні плагіату, або використанні не своїх даних, робота вважається не виконаною і, відповідно, не оцінюється.