

**ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД
«УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ»
НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ІНСТИТУТ ХІМІЇ ТА ЕКОЛОГІЇ
Кафедра органічної хімії**

**«ЗАТВЕРДЖУЮ»**
Директор ІНІХЕ
/Василь ЛЕНДЕЛ./
«26» серпня 2023 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

МОЛЕКУЛЯРНИЙ ДИЗАЙН

Рівень вищої освіти	магістр
Галузь знань	10 Природничі науки
Спеціальність	102 Хімія
Освітня програма	Хімія
Статус дисципліни	вибіркова дисципліна із кафедрального каталогу
Мова навчання	українська

Ужгород 2023

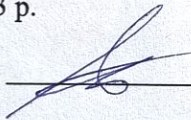
Робоча програма навчальної дисципліни «Молекулярний дизайн» для здобувачів вищої освіти галузі знань «10 Природничі науки» спеціальності «102 Хімія» освітньої програми «Хімія».

Розробники: Король Н.І., доцент кафедри органічної хімії, кандидат хімічних наук,
доцент

Робочу програму розглянуто та затверджено на засіданні кафедри органічної хімії протокол №9 від «08» червня 2023 р.

Завідувач кафедрою  Михайло ОНИСЬКО

Схвалено науково-методичною комісією навчально-наукового інституту хімії та екології протокол №10 від «26» червня 2023 р.

Голова науково-методичної комісії  Михайло СЛИВКА

© Король Н.І., 2023 р.

© ДВНЗ «Ужгородський національний університет», 2023 р.

1. ОПИС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Найменування показників	Розподіл годин за навчальним планом	
	Денна форма навчання	Заочна форма навчання
Кількість кредитів ЄКТС – 4	Рік підготовки:	
Загальна кількість годин – 120	2-ий	
Кількість модулів –1	Семестр:	
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних –4 самостійної роботи студента –11	3 семестр	
	Лекції:	
	18	
	Практичні (семінарські):	
	24	
Вид підсумкового контролю: модуль	Лабораторні:	
Форма підсумкового контролю: залік	Самостійна робота:	
	78	

2. МЕТА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Мета: Молекулярний дизайн (або дизайн молекул) - це інтердисциплінарна галузь науки, яка поєднує в собі хімію, фізику, біологію та інші наукові дисципліни з метою створення нових молекул та матеріалів з певними бажаними властивостями і функціями. Основна ідея молекулярного дизайну полягає в тому, щоб раціонально проектувати і маніпулювати атомами, функціональними групами та молекулами для досягнення конкретних цілей.

Ця наукова галузь використовує різні інструменти і методи, такі як квантова хімія, обчислювальна хімія, синтез хімічних сполук, біомолекулярне моделювання та інші для розробки нових матеріалів, лікарських препаратів, каталізаторів, полімерів, наноматеріалів тощо.

Молекулярний дизайн має велике практичне застосування в різних галузях, включаючи фармацевтику, матеріалознавство, електроніку, каталіз, інформаційні технології і багато інших. Він дозволяє вдосконалювати і створювати нові продукти та технології, що сприяє розвитку сучасного наукового і технологічного прогресу.

Мета дисципліни: надати студентам глибокі знання щодо хімії, фізики та біології на молекулярному рівні, допомагаючи їм розуміти, як взаємодіють атоми та молекули; навчити використовувати різні обчислювальні та експериментальні методи для проектування молекул і матеріалів з певними властивостями; надати знання і навички, необхідні для розробки нових матеріалів, лікарських препаратів, технологій, каталізаторів та інших продуктів, які можуть бути корисними у реальному житті і в індустрії.

Завдання: вивчення основ молекулярної структури та взаємодії атомів та молекул; вивчення хімічних методів синтезу і аналізу молекул для їхнього подальшого застосування в дизайні; навчання студентів використовувати обчислювальні методи для моделювання молекулярних структур та властивостей; студенти навчаються самостійно розробляти нові матеріали з певними властивостями, такими як міцність, провідність, стійкість до корозії, а також лікарські речовини, які могли б бути використані для лікування різних захворювань; проведення аналізу біологічних молекул і їх взаємодій, наприклад, вивчення ферментів або біологічних мембран.

Загальні компетентності:

ЗК 1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК 5. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій.

ЗК 6. Здатність спілкуватися іноземною мовою.

ФК 4. Здатність до використання спеціального програмного забезпечення та моделювання в хімії.

ФК 5. Здатність здійснювати сучасні методи аналізу даних.

ФК 13. Здатність до роботи в комп'ютерних мережах, використання сучасних інформаційно-комунікаційних технологій (ІКТ) та програмних засобів для обробки хімічних даних.

3. ПЕРЕДУМОВИ ДЛЯ ВИВЧЕННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Передумовами вивчення навчальної дисципліни «**Молекулярний дизайн**» є опанування таких навчальних дисциплін (НД) освітньої програми (ОП):

Шифр НД за ОП	ОК 7. Обчислювальна техніка і основи програмування
	ОК 14. Квантова механіка і квантова хімія
	ОК 17. Органічна хімія
	ОК 20. Біоорганічна хімія

4. ОЧІКУВАНІ РЕЗУЛЬТАТИ НАВЧАННЯ

Відповідно до освітньої програми «**Молекулярний дизайн**», вивчення навчальної дисципліни повинно забезпечити досягнення здобувачами вищої освіти таких програмних результатів навчання (ПРН):

Програмні результати навчання	Шифр ПРН
Розуміти ключові хімічні поняття, основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються природничих наук та наук про життя і землю, а також хімічних технологій на рівні, достатньому для їх застосування у професійній діяльності та для забезпечення можливості в подальшому глибоко розуміти спеціалізовані області хімії.	ПРН 1
Застосовувати основні принципи квантової механіки для опису будови атома, молекул та хімічного зв'язку.	ПРН 7
Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.	ПРН 16

Очікувані результати навчання, які повинні бути досягнуті здобувачами освіти після опанування навчальної дисципліни «Молекулярний дизайн»:

Очікувані результати навчання з дисципліни	Шифр ПРН
Застосовувати свої знання, розуміння, навички та основні інженерні технологічні вміння на практиці для розв'язання завдань та проблем, які вже відомі.	ПРН 19
Ефективно висловлювати результати своїх досліджень у письмовій формі як державною, так і іноземною мовою, з урахуванням мети комунікації.	ПРН 23
Застосовувати сучасні технології з інформаційно-комунікаційного сектору для комунікації та обробки даних, а також для збору та аналізу інформації.	ПРН 24

5. ЗАСОБИ ДІАГНОСТИКИ ТА КРИТЕРІЇ ОЦІНЮВАННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ НАВЧАННЯ

Засоби оцінювання та методи демонстрування результатів навчання

Засобами оцінювання та методами демонстрування результатів навчання з навчальної дисципліни є:

Поточне оцінювання рівня засвоєння теми здійснюється на кожному практичному занятті. Рейтингова оцінка формується на основі поточних оцінок та результатів виконання модульної контрольної роботи. Підсумкова оцінка за дисципліну може дорівнювати рейтинговій або ж встановлюватись за підсумками складання заліку. Наявність у студента 4 і більше годин невідпрацьованих практичних занять є невиконанням індивідуального навчального плану.

Форми контролю та критерії оцінювання результатів навчання

Форми поточного контролю: виконана звітна робота за відповідною темою
 Форма модульного контролю: контрольна робота
 Форма підсумкового семестрового контролю: залік

Розподіл балів, які отримують здобувачі вищої освіти (модуль 1)

Поточне оцінювання та самостійна робота									Модульна контрольна робота	Сума
T1	T2	T3	T4	T5			25	50
5	5	5	5	5						

T1, T2 ... – теми

Розподіл балів, які отримують здобувачі вищої освіти (модуль 2)

Поточне оцінювання та самостійна робота								Модульна контрольна робота	Сума
T1	T2	T3	T4			30	50
5	5	5	5						

T1, T2 ... – теми

Оцінювання окремих видів навчальної роботи з дисципліни

Вид діяльності здобувача вищої освіти	Модуль 1		Модуль 2	
	Кількість	Максимальна кількість балів (сумарна)	Кількість	Максимальна кількість балів (сумарна)
Практичні заняття (виконання та захист)	5	25	4	20
Модульна контрольна робота	1	25	1	30
Разом		50		50

Критерії оцінювання модульної контрольної роботи

Оцінювання знань студентів з навчальної дисципліни «Молекулярний дизайн» здійснюється на основі результатів поточного та підсумкового контролю.

Об'єктом оцінювання знань студентів є програмний матеріал навчальної дисципліни «Молекулярний дизайн».

Поточний контроль здійснюється під час проведення практичних занять і має на меті перевірку рівня підготовки студентів.

Завданням поточного контролю є перевірка розуміння та засвоєння лекційного матеріалу, набуття практичних навичок при розв'язуванні завдань, уміння самостійно опрацьовувати теоретичний матеріал, висловлювати та обґрунтовувати власні думки, проводити презентацію опрацьованого матеріалу, самостійно виконувати молекулярне моделювання згідно з поставленими завданнями. Завданням підсумкового контролю (заліку) є перевірка розуміння студентами програмного матеріалу в цілому, здатності логічно та послідовно розв'язувати практичні задачі, творчо використовувати накопичені знання, представляти та описувати одержані результати.

Результати поточного оцінювання роботи студентів вносяться у журнал обліку роботи викладача.

Об'єктами поточного контролю знань студентів є:

- активність та результативність роботи на практичних заняттях;
- виконання завдань для самостійного опрацювання;
- виконання індивідуальної роботи;
- виконання модульної контрольної роботи.

Виконання модульної контрольної роботи передбачає надання відповідей на тести. Модульна контрольна робота містить 20 тестів. За кожну правильну відповідь на 1 тестове завдання виставляється 2 бали, за неправильну відповідь – 0 балів.

До модульної контрольної роботи допускаються студенти, які відвідали не менше 50% аудиторних занять і отримали не менше 35% від можливої кількості балів за поточну роботу.

Ті студенти, які за результатами поточного контролю отримали 35% і більше від максимально можливої кількості балів, допускаються до заліку.

Залікова картка містить 5 завдань.

Шкала оцінювання: національна та ECTS

Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою	
		для екзамену	для заліку
90 – 100	A	відмінно	зараховано
82-89	B	добре	
74-81	C		
64-73	D	задовільно	
60-63	E		
35-59	FX	незадовільно з можливістю повторного складання	не зараховано з можливістю повторного складання
0-34	F	незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни	не зараховано з обов'язковим повторним вивченням дисципліни

За результатами контролю знань студентів, дозволяється виставлення екзаменаційної оцінки (без екзаменів) – «відмінно», «добре», та «задовільно» (D). Студент має право підвищити оцінку, складаючи екзамен.

Оцінки FX, F (“2”) виставляються студентам, яким не зараховано хоча б один модуль з дисципліни після завершення її вивчення.

Студенту з оцінкою FX дозволяється скласти підсумковий модульний контроль. У випадку повторного одержання ним незадовільної оцінки, студент має право на повторне складання підсумкового модульного контролю (заліку) не більше 2-х разів, згідно затвердженого графіка.

Студенти, які одержали оцінку F по завершенню вивчення дисципліни (не виконали навчальну програму хоча б з одного модуля, або не набрали за поточну навчальну діяльність з модуля мінімальну кількість балів), повинні пройти повторне навчання за індивідуальним навчальним планом.

6. ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

6.1. Зміст навчальної дисципліни

Модуль 1. Молекулярний дизайн як інноваційний підхід до створення нових функціональних органічних сполук.

Тема № 1. Вступ. Історія виникнення молекулярного дизайну. Роль молекулярного дизайну в розробці та створенні нових лікарських препаратів та інших функціональних речовин. Підходи до створення нових сполук з визначеними цільовими властивостями (2 год.).

Визначення молекулярного дизайну та його основні аспекти. Історія виникнення молекулярного дизайну. Виникнення і розвиток молекулярного дизайну в хімії та інших науках. Внесок видатних вчених, таких як Лейбїг, Полінг, Дженкінсон та інших, у розвиток цієї галузі. Етапи і критичні моменти в історії молекулярного дизайну.

Роль молекулярного дизайну в розробці лікарських препаратів та інших функціональних речовин. Молекулярний дизайн у фармації: концепція та переваги. Взаємодія лікарських речовин з біологічними системами. Приклади успішних лікарських препаратів, розроблених завдяки молекулярному дизайну. Застосування молекулярного дизайну у створенні каталізаторів, нових матеріалів, сонячних елементів тощо.

Тема № 2. Підходи до створення нових сполук з визначеними цільовими властивостями (2 год.).

Підходи до створення нових сполук з визначеними цільовими властивостями. Обчислювальний молекулярний дизайн: використання комп'ютерних методів для прогнозування структури та властивостей молекул. Методи обчислювального моделювання, включаючи квантово-хімічні розрахунки та молекулярні докінги. Раціональний дизайн: проектування молекул на основі розуміння їх структури і взаємодій з цільовими біологічними молекулами. Випробувальний дизайн: експериментальні методи синтезу та аналізу молекул з подальшою оптимізацією на основі результатів.

Використання молекулярного дизайну у вирішенні сучасних завдань. Вплив молекулярного дизайну на розвиток нових технологій та інновацій у різних галузях. Перспективи використання молекулярного дизайну в медицині, енергетиці, матеріалознавстві, електроніці тощо. Сучасні виклики і завдання, які можуть бути вирішені за допомогою молекулярного дизайну.

Тема № 3. ADMET. Можливості та застосування підходу у молекулярному дизайні (2 год.).

Визначення поняття ADMET та його скорочення (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, Toxicity). Основні аспекти ADMET.

Адсорбція (Absorption): Вплив фізико-хімічних властивостей молекул на їх адсорбцію в організмі. Важливість бар'єрів адсорбції, таких як бар'єри крові-мозку і кров'яно-бар'єрні функції органів.

Розподіл (Distribution): Взаємодія молекул з тканинами та органами. Основні фактори, що впливають на розподіл речовин у тілі.

Метаболізм (Metabolism): Роль ферментів та біохімічних процесів у метаболізмі лікарських речовин. Важливість реакцій метаболізму для активності і токсичності.

Виведення (Excretion): Процеси виведення молекул із організму через нирки та інші екскреторні шляхи. Вплив різних чинників на ефективність виведення.

Токсичність (Toxicity): Оцінка токсичності лікарських речовин і хімічних сполук. Механізми та методи оцінки токсичності.

Застосування ADMET в молекулярному дизайні. Роль ADMET у фармацевтичній промисловості: Оптимізація лікарських препаратів з точки зору ADMET. Передклінічні та клінічні випробування. Методи та інструменти для врахування ADMET у молекулярному дизайні: Обчислювальні методи для прогнозування ADMET властивостей. Вивчення структури-активності в контексті ADMET.

Переваги та виклики використання ADMET у молекулярному дизайні: Мінімізація ризиків та покращення ефективності розробки лікарських препаратів. Важливість співпраці між хіміками та біологами.

Приклади успішного використання ADMET у молекулярному дизайні. Випадки розробки лікарських препаратів, які демонструють високу ефективність та безпеку завдяки врахуванню ADMET аспектів. Приклади збалансованих підходів до оптимізації молекулярних структур на основі ADMET даних.

Тема № 4. QSAR/QSPR (2 год.).

Значення QSAR і QSPR у молекулярному дизайні та науці про молекулярну інформатику. Основні концепції QSAR і QSPR.

QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship): Визначення QSAR та її історія. Засади і призначення QSAR в підході до молекулярного дизайну. Параметри QSAR моделей та їх значення.

QSPR (Quantitative Structure-Property Relationship): Визначення QSPR та порівняння з QSAR. Використання QSPR для прогнозування різних фізико-хімічних властивостей речовин.

Основні етапи розробки QSAR і QSPR моделей. Вибір даних (Data Selection): Збір і відбір даних для створення навчального набору. Важливість якісних та кількісних даних. Обробка даних (Data Preprocessing): Нормалізація даних та видалення аномалій. Кодування молекулярної структури. Моделювання (Modeling): Вибір математичного методу для створення QSAR/QSPR моделі. Навчання та калібрування моделі. Оцінка якості моделі (Model Evaluation): Визначення показників якості, таких як R², Q², RMSE, ROC-AUC тощо. Перехресна перевірка і зовнішнє тестування моделі.

Приклади застосування QSAR і QSPR. QSAR у фармації: Використання QSAR для дизайну лікарських речовин. Приклади успішних досліджень і розробок. QSPR у матеріалознавстві: Вплив структури на фізико-хімічні властивості матеріалів. Застосування QSPR для оптимізації нових матеріалів.

Виклики і перспективи використання QSAR/QSPR. Застосування машинного навчання і штучного інтелекту в QSAR/QSPR. Сучасні виклики і перспективи розробки точних і надійних моделей. Потенційні обмеження та шляхи їх подолання.

Тема №5. Молекулярний докінг (2 год).

Важливість молекулярного докінгу у молекулярному дизайні і біологічних дослідженнях. Основні поняття молекулярного докінгу.

Молекулярна взаємодія (Molecular Interaction): Визначення та роль молекулярних взаємодій в біології та хімії. Значення розуміння молекулярних взаємодій у дизайні лікарських препаратів.

Молекулярний докінг (Molecular Docking): Визначення та основні ідеї молекулярного докінгу. Роль молекулярного докінгу у віртуальному скринінгу і прогнозуванні біологічної активності сполук.

Принципи роботи молекулярного докінгу. Складання молекулярних комплексів (Molecular Complex Assembly): Побудова тривимірних моделей молекулярних комплексів. Розгляд типових методів і програм для складання. Оцінка взаємодії (Scoring): Переваги і виклики визначення енергії зв'язку. Методи оцінки афінності молекулярних комплексів. Валідація і калібрування (Validation and Calibration): Важливість валідації моделей молекулярного докінгу. Способи калібрування моделей для підвищення точності.

Модуль 2. Молекулярний дизайн як інноваційний підхід до створення нових лікарських препаратів органічної природи.

Тема №1. Застосування молекулярного докінгу як підходу до створення нових лікарських препаратів органічної природи (2 год).

Застосування молекулярного докінгу. Лікарська хімія і фармацевтика: Використання молекулярного докінгу у розробці лікарських препаратів. Приклади успішних досліджень і розробок. Біологічні дослідження: Вплив молекулярного докінгу на дослідження біологічних процесів. Використання молекулярного докінгу для розуміння функцій біомолекул.

Виклики і перспективи молекулярного докінгу. Використання обчислювальних методів (Computational Methods): Роль машинного навчання і штучного інтелекту в молекулярному докінгу. Потенційні переваги та виклики. Оптимізація обчислювальної швидкості (Computational Speed Optimization): Покращення алгоритмів для ефективного проведення молекулярного докінгу. Використання обчислювальних кластерів та хмарних обчислень. Етичні питання та безпека (Ethical Considerations and Security): Важливість етики у використанні даних і обчислювальних методів у молекулярному докінгу. Заходи безпеки для захисту важливих даних.

Тема № 2. CoMFA (2 год.).

Визначення поняття CoMFA та скорочення (Comparative Molecular Field Analysis). Значення CoMFA у молекулярному дизайні та хімічних дослідженнях. Основні концепції CoMFA. Молекулярне поле (Molecular Field): Визначення та роль молекулярних полів у CoMFA.

Значення розуміння молекулярних полів у віртуальному скринінгу і прогнозуванні біологічної активності сполук. Опис фізико-хімічних властивостей (Descriptors): Важливість опису різних фізико-хімічних властивостей молекул. Вибір та використання дескрипторів у CoMFA аналізі.

Принципи роботи CoMFA. Побудова молекулярного поля (Molecular Field Construction): Вибір типів молекулярних полів у CoMFA (електростатичні, стеричні, гідрофобні тощо). Побудова тривимірних моделей молекулярного поля. Контури молекулярного поля (Molecular Field Grids): Створення ґридів молекулярного поля для взаємодії з молекулярними структурами. Розгляд типових методів для розрахунку контурів молекулярного поля. Аналіз різниць (Comparative Analysis): Переваги порівняльного аналізу молекулярних полів у CoMFA. Значення розуміння структурних відмінностей молекул.

Тема № 8. Застосування CoMFA як підходу до створення нових лікарських препаратів органічної природи (2 год.).

Застосування CoMFA. Дизайн лікарських препаратів (Drug Design): Використання CoMFA для оптимізації структур лікарських речовин. Приклади успішних досліджень і розробок у лікарській хімії. Прогнозування біологічної активності (Biological Activity Prediction): Важливість CoMFA у прогнозуванні активності речовин на основі їх структур. Приклади використання CoMFA для прогнозування активності біологічних молекул.

Виклики і перспективи використання CoMFA. Обчислювальні методи (Computational Methods): Роль машинного навчання і штучного інтелекту в CoMFA. Перспективи використання нових методів для поліпшення аналізу. Розширення застосування (Applications Expansion): Важливість розширення використання CoMFA на інші галузі хімії та біології. Потенційні нові напрямки досліджень.

Тема № 9. Виклики, проблеми та перспективи молекулярного дизайну (2 год.).

Виклики молекулярного дизайну. Складність молекулярних систем. Великі біомолекули. Взаємодія між атомами та молекулами. Квантово-механічні обчислення та обмеження обчислювальної потужності. Оптимізація молекулярних структур. Проблеми стабільності та реакційної здатності.

Перспективи молекулярного дизайну. Молекулярний дизайн у фармації. Молекулярний дизайн у матеріалознавстві. Молекулярний дизайн у каталізі та зеленій хімії. Молекулярний дизайн у біотехнологіях. Можливості для інновацій та нових відкриттів.

Роль машинного навчання та штучного інтелекту в молекулярному дизайні. Використання машинного навчання в аналізі молекулярних структур. Штучний інтелект у процесі молекулярного дизайну. Переваги та виклики інтеграції інтелектуальних систем у молекулярний дизайн.

Розширення застосування молекулярного дизайну. Використання молекулярного дизайну в інших галузях хімії. Потенційні нові напрямки досліджень та застосувань молекулярного дизайну.

Висновки. Підсумок ключових висновків. Важливість молекулярного дизайну в сучасному світі.

6.2. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин				
	Форма навчання:				
	Усього	у тому числі			
лекції		практичні (семінарські)	лабораторні	індивідуальна робота	самостійна робота
Модуль 1					
Тема № 1. Вступ. Історія виникнення молекулярного дизайну. Роль молекулярного дизайну в розробці та створенні нових лікарських препаратів та інших функціональних речовин.		2			
Тема № 2. Підходи до створення нових сполук з визначеними цільовими властивостями.		2			
Тема № 3. ADMET. Можливості та застосування підходу у молекулярному дизайні.		2	4		
Тема № 4. QSAR/QSPR.		2	4		20
Тема №5. Молекулярний докінг.		2	4		18
Модульна контрольна робота					
Разом за модуль		10	12		38
Модуль 2					
Тема №1. Застосування молекулярного докінгу як підходу до створення нових лікарських препаратів органічної природи.		2	4		20
Тема №2. CoMFA.		2	4		20
Тема №3. Застосування CoMFA як підходу до створення нових лікарських препаратів органічної природи.		2	4		
Тема № 4. Виклики, проблеми та перспективи молекулярного дизайну.		2			
Модульна контрольна робота					
Разом за модуль		8	12		40
Разом за семестр	120	18	24		78

6.3. Теми практичних

№ з/п	Назва теми	Кількість годин	
		денна	заочна
1	ADMET. Можливості та застосування підходу у молекулярному дизайні.	4	
2	QSAR/QSPR.	4	
3	Молекулярний докінг.	4	
4	Застосування молекулярного докінгу як підходу до створення нових лікарських препаратів органічної природи.	4	
5	CoMFA.	4	
6	Застосування CoMFA як підходу до створення нових лікарських препаратів органічної природи.		
Разом		24	

6.4. Самостійна робота

№ з/п	Назва теми	Кількість годин	
		денна	заочна
1	Обчислювальний молекулярний дизайн: Розгляд методів обчислювального моделювання та прогнозування властивостей молекул для розробки нових сполук. Структура-активність (SAR): Аналіз взаємозв'язку між структурою і біологічною активністю молекул для розуміння їхньої дії. Комп'ютерний скринінг сполук: Використання обчислювальних методів для відбору потенційно активних сполук з великої бібліотеки.	18	
2	Раціональний дизайн лікарських препаратів: Розробка нових лікарських засобів на основі розуміння молекулярних механізмів. Молекулярний дизайн матеріалів: Використання молекулярного дизайну для створення нових матеріалів з певними фізико-хімічними властивостями. Молекулярний дизайн каталізаторів: Розробка каталізаторів для хімічних реакцій за допомогою раціонального дизайну.	20	
3	Вплив молекулярного дизайну на фармацевтичну промисловість: Вивчення успішних прикладів впровадження молекулярного дизайну у фармацевтиці. Біоінформатика та молекулярний дизайн: Використання біоінформатичних методів для дослідження молекулярних структур.	20	
4	Етичні аспекти молекулярного дизайну: Розгляд етичних питань у використанні молекулярного дизайну в дослідженнях і промисловості. Молекулярний дизайн у вирішенні глобальних викликів: Вплив молекулярного дизайну на розробку нових технологій та матеріалів для вирішення проблем здоров'я, енергетики, довкілля і біорізноманітності.	20	
Разом		78	

7. РЕКОМЕНДОВАНІ ДЖЕРЕЛА ІНФОРМАЦІЇ

Основна література

1. Thomas J. Perun. Computer-Aided Drug Design: Methods and Applications. Taylor & Francis, 1989, 510с.
2. Frank Jensen. Introduction to Computational Chemistry. John Wiley & Sons, 2017, 664с.
3. Errol G. Lewars. Computational Chemistry Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics. Springer Dordrecht, 2011, 664с.
4. Jan H. Jensen. Molecular Modeling Basics. Routledge, 2010, 166с.
5. Andrew R. Leach. Molecular Modelling: Principles and Applications. Pearson Education, 2011, 744с.

Допоміжні джерела

1. **PubChem** (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>): PubChem - це безкоштовна база даних, яка містить інформацію про молекулярні структури, властивості та біологічну активність сполук. Ви можете використовувати цей ресурс для пошуку молекулярних даних і вивчення їх властивостей.
2. **ChemSpider** (<http://www.chemspider.com/>): ChemSpider - це інша безкоштовна база даних, яка містить інформацію про хімічні сполуки, їхні властивості та молекулярні структури.
3. **ChemDraw** (<https://chemdraw.com/>): ChemDraw - це популярний програмний інструмент для малювання хімічних структур і роботи з ними. Існують онлайн-версії ChemDraw, які можна використовувати безпосередньо у веб-браузері.
4. **Molecular Operating Environment (MOE)** (<https://www.chemcomp.com/Products.htm>): MOE - це програмне забезпечення для молекулярного моделювання та дизайну. Існують безкоштовні веб-версії MOE для виконання певних обчислень у веб-браузері.
5. **Chemicalize** (<https://chemicalize.com/>): Chemicalize - це онлайн-інструмент для аналізу хімічних структур та розрахунку різних хімічних параметрів.
6. **ChemBI Navigator** (<https://chembl.gitbook.io/chembl-interface-documentation/>): Це документація інтерфейсу ChemBI, яка допомагає розуміти, як працювати з базою даних ChemBI, яка містить інформацію про лікарські речовини та їхню біологічну активність.
7. **RDKit** (<https://www.rdkit.org/>): RDKit - це набір відкритих інструментів для обробки хімічних даних та роботи з молекулярними структурами. Інструменти RDKit доступні для використання в Python.
8. **UCI Machine Learning Repository - QSAR Dataset** (<https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/QSAR+biodegradation>): Цей репозиторій містить набір даних для вправ та досліджень у сфері QSAR.

**Результати перегляду
робочої програми навчальної дисципліни**

Робоча програма перезатверджена на 20___ / 20___ н.р. без змін; зі змінами (Додаток ___).
(потрібне підкреслити)

протокол № ___ від « ___ » _____ 20 ___ р. Завідувач кафедри _____
(підпис) (Прізвище ініціали)

Робоча програма перезатверджена на 20___ / 20___ н.р. без змін; зі змінами (Додаток ___).
(потрібне підкреслити)

протокол № ___ від « ___ » _____ 20 ___ р. Завідувач кафедри _____
(підпис) (Прізвище ініціали)

Робоча програма перезатверджена на 20___ / 20___ н.р. без змін; зі змінами (Додаток ___).
(потрібне підкреслити)

протокол № ___ від « ___ » _____ 20 ___ р. Завідувач кафедри _____
(підпис) (Прізвище ініціали)

Робоча програма перезатверджена на 20___ / 20___ н.р. без змін; зі змінами (Додаток ___).
(потрібне підкреслити)

протокол № ___ від « ___ » _____ 20 ___ р. Завідувач кафедри _____
(підпис) (Прізвище ініціали)