

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**  
**Факультет радіофізики, електроніки та комп'ютерних систем**  
**Кафедра медичної радіофізики**

**«ЗАТВЕРДЖУЮ»**

Заступник декана з навчальної роботи

\_\_\_\_\_ Олексій НЕЧИПОРУК

« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2022 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

**Комп'ютерна розробка лікарських препаратів**

**для студентів**

|                     |   |
|---------------------|---|
| галузь знань        | 10 Природничі науки                         |
| спеціальність       | 105 Прикладна фізика та наноматеріали       |
| рівень вищої освіти | другий                                      |
| освітня програма    | Біомедична фізика, інженерія та інформатика |
| вид дисципліни      | вибіркова                                   |

|                           |            |
|---------------------------|------------|
| Форма навчання            | денна      |
| Навчальний рік            | 2022/2023  |
| Семестр                   | 3          |
| Кількість кредитів ECTS   | 3          |
| Мова викладання           | українська |
| Форма заключного контролю | іспит      |

**Викладачі:**

**Судаков Олександр Олександрович**, доцент, кандидат фіз.-мат. наук, доцент кафедри медичної радіофізики

**Висоцький Володимир Іванович**, професор, доктор фіз.-мат. наук, завідувач кафедри математики та теоретичної радіофізики

Пролонговано: на 20\_\_/20\_\_ н. р. \_\_\_\_\_ ( \_\_\_\_\_ ) « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

на 20\_\_/20\_\_ н. р. \_\_\_\_\_ ( \_\_\_\_\_ ) « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

**Розробники:**

**Судаков Олександр Олександрович**, доцент, кандидат фіз.-мат. наук, доцент кафедри медичної радіофізики

**Висоцький Володимир Іванович**, професор, доктор фіз.-мат. наук, завідувач кафедри математики та теоретичної радіофізики

**«ЗАТВЕРДЖЕНО»**

Завідувач кафедри медичної радіофізики

\_\_\_\_\_ Сергій РАДЧЕНКО

Протокол № \_\_ від « \_\_ » \_\_\_\_\_ 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією факультету радіофізики, електроніки та комп'ютерних систем

Протокол № \_\_ від « \_\_ » \_\_\_\_\_ 2022 р.

Голова науково-методичної комісії

Сергій РАДЧЕНКО

« \_\_ » \_\_\_\_\_ 2022 року.

## ВСТУП

**1. Мета дисципліни** "Комп'ютерна розробка лікарських препаратів" полягає в опануванні студентами основ застосування сучасних комп'ютерних технологій у розробці лікарських препаратів, молекулярному моделюванні, біохімії

### **2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:**

Навчальна дисципліна "Комп'ютерна розробка лікарських препаратів" є складовою циклу професійної підготовки фахівців освітньо-кваліфікаційного рівня "магістр" і спирається на знання, отримані в курсах з квантової механіки, електродинаміки, статистичної фізики, молекулярної фізики, алгоритмів та методів обчислень, математичних та фізичних дисциплін дисциплін.

Попередні вимоги:

*студент повинен знати:* основи молекулярної фізики, квантової механіки, електродинаміки, статистичної фізики та математичних дисциплін у обсязі програм бакалаврату з прикладної фізики

*студент повинен вміти:* вирішувати задачі з квантової механіки, електродинаміки та молекулярної фізики і застосовувати відповідних математичних апарат

### **3. Анотація навчальної дисципліни:**

Надаються основи квантово-механічних, напівкласичних та класичних методів моделювання електронної структури та геометрії ансамблів простих молекул типу молекул води, складних молекул, застосування цих методів для розробки лікарських препаратів та інших задач молекулярного моделювання.

### **4. Завдання навчальної дисципліни (навчальні цілі):**

1. Студент повинен знати основи комп'ютерного моделювання складних молекул та ансамблів простих молекул;

2 Студент повинен навчитись застосовувати основи комп'ютерного моделювання складних молекул та ансамблів простих молекул для вирішення задач комп'ютерної розробки лікарських препаратів

Дисципліна спрямована на формування програмних компетентностей:

– коди, назви компетентностей із переліку компетентностей в описі освітньої програми

ВБ 2.5 - Комп'ютерна розробка лікарських препаратів

ЗК 2 - Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності

ЗК 5 – Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій

ЗК 8 - Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел

ФК 12 – Здатність брати участь у роботі над інноваційними проєктами, використовуючи базові методи дослідницької діяльності

ПРН 2 - Показувати знання в галузі професійної діяльності, технологій та методів дослідження властивостей речовин і матеріалів, включаючи наноматеріали

ПРН 3 - Знаходити науково-технічну інформацію з різних джерел з використанням сучасних інформаційних технологій

ПРН 4 - Показувати знання іноземної мови

ПРН 7 - Застосовувати фізичні, математичні та комп'ютерні моделі для дослідження фізичних явищ, приладів і наукоємних технологій

ПРН 10 - Використовувати сучасні методи і технології наукової комунікації українською та іноземними мовами

ПРН 15 - Вміти представляти і захищати отримані наукові і практичні результати в усній та письмовій формі

## 5. Результати навчання за дисципліною:

| Результат навчання (1, знати; 2, вміти; 3, комунікація; 4, автономність та відповідальність) |   | Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання | Методи оцінювання та пороговий критерій оцінювання (за необхідності) | Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни |
|--|---|--|--|--|
| Код  | Результат навчання  |  |  |  |
| <b>1</b>   | <b>знати:</b>   | лекційні заняття   | Модульний контроль   | до 36                                      |
| 1.1  | Теорія Хартрі-Фока  | <i>Лекція 1-3</i>  | Модульний контроль   | 3  |
| 1.2  | Основні квантово-хімічні задачі   | <i>Лекція 4</i>  | Модульний контроль   | 3  |
| 1.3  | Врахування електронної кореляції  | <i>Лекція 5</i>  | Модульний контроль   | 3  |
| 1.4  | Розрахунок фізичних, хімічних та інших характеристик на молекулярному рівні   | <i>Лекція 6-7</i>  | Модульний контроль   | 3  |
| 1.5  | Напівемпіричні методи   | <i>Лекція 8</i>  | Модульний контроль   | 3  |
| 1.6  | Молекулярна динаміка і докінг   | <i>Лекція 9</i>  | Модульний контроль   | 3  |
| 1.7  | Базові фізико-хімічні та біофізичні властивості різних типів структурованої та безструктурної води  | <i>Лекція 10</i>   | Модульний контроль   | 3  |
| 1.8  | Структуру, квантовомеханічні та електродинамічні властивості клатратної моделі води і принципи її використання для транспортування молекул та наноліків в організмі   | <i>Лекція 11</i>   | Модульний контроль   | 3  |
| 1.9  | Особливості впливу води на дистанційну та пряму взаємодію атомів, йонів та біомолекул, а також на процеси ділення клітин і реплікацію ДНК                             | <i>Лекції 12-13</i>                                      | Модульний контроль   | 3  |
| 1.10   | Методи генної інженерії та принципи і системи контрольованого зовнішнього впливу на мутацію ДНК   | <i>Лекція 14</i>   | Модульний контроль   | 3  |
| 1.11   | Фактори та методи впливу водного середовища на ефективність дії селективних біомембран  | <i>Лекція 15</i>   | Модульний контроль   | 3  |
| <b>2</b>   | <b>вміти:</b>   | лекційні заняття   | Модульний контроль   | до 14                                      |
| 2.1  | Розв'язувати базові задачі керованого транспортування атомів, йонів і біомолекул в водному середовищі і вирішувати задачі комп'ютерної розробки лікарських препаратів | <i>Лекції</i>  | Модульний контроль   | 14   |
| <b>3</b>   | <b>комунікація:</b>   | лекційні заняття   | Модульний контроль   | до 5                                       |
| 3.1  | Здатність грамотно будувати наукову комунікацію як в усній так і письмовій формах, підбирати правильну термінологію   | <i>Лекції,</i>   | Модульний контроль   | 3  |
| 3.2  | Здатність до командної роботи у великих науково-дослідницьких проектах  | <i>Лекції,</i>   | Модульний контроль   | 2  |
| <b>4</b>   | <b>автономність та відповідальність:</b>  | лекційні заняття   | Модульний контроль   | до 5                                       |
| 4.1  | Здатність до самостійного пошуку наукової літератури або інших джерел інформації для розв'язання поставленої перед студентом науково-дослідницької задачі             | <i>Лекції,</i>   | Модульний контроль   | 5  |

**6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання**

| Результати навчання дисципліни  | Код |     |     |     |     |     |     |     |     |      |      |     |     |     |     |   |
|---|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|------|------|-----|-----|-----|-----|---|
|   | 1.1 | 1.2 | 1.3 | 1.4 | 1.5 | 1.6 | 1.7 | 1.8 | 1.9 | 1.10 | 1.11 | 2.1 | 3.1 | 3.2 | 4.1 |   |
| <b>Програмні результати навчання (назва)</b>  |     |     |     |     |     |     |     |     |     |      |      |     |     |     |     |   |
| ЗК 2 - Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності   | +   | +   | +   | +   | +   | +   | +   | +   | +   | +    | +    | +   | +   | +   | +   | + |
| ЗК 5 – Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій   |     |     |     |     |     |     |     |     |     |      |      |     |     | +   | +   | + |
| ЗК 8 - Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел  |     |     |     |     |     |     |     |     |     |      |      |     |     | +   | +   | + |
| ФК 12 – Здатність брати участь у роботі над інноваційними проектами, використовуючи базові методи дослідницької діяльності                              |     |     |     |     |     |     |     |     |     |      |      |     |     | +   | +   | + |
| ПРН 2 - Показувати знання в галузі професійної діяльності, технологій та методів дослідження властивостей речовин і матеріалів, включаючи наноматеріали | +   | +   | +   | +   | +   | +   | +   | +   | +   | +    | +    | +   | +   | +   | +   | + |
| ПРН 3 - Знаходити науково-технічну інформацію з різних джерел з використанням сучасних інформаційних технологій   | +   | +   | +   | +   | +   | +   | +   | +   | +   | +    | +    | +   | +   | +   | +   | + |
| ПРН 4 - Показувати знання іноземної мови  |     |     |     |     |     |     |     |     |     |      |      |     |     | +   | +   | + |
| ПРН 7 - Застосовувати фізичні, математичні та комп'ютерні моделі для дослідження фізичних явищ, приладів і наукоємних технологій                        | +   | +   | +   | +   | +   | +   | +   | +   | +   | +    | +    | +   |     |     |     |   |
| ПРН 10 - Використовувати сучасні методи і технології наукової комунікації українською та іноземними мовами  |     |     |     |     |     |     |     |     |     |      |      |     |     | +   | +   | + |
| ПРН 15 - Вміти представляти і захищати отримані наукові і практичні результати в усній та письмовій формі   |     |     |     |     |     |     |     |     |     |      |      |     |     | +   | +   | + |

## 7. Схема формування оцінки

### 7.1. Форми оцінювання

Рівень досягнення всіх запланованих результатів навчання визначається за результатами виконання індивідуальних завдань. Внесок результатів навчання у підсумкову оцінку, за умови їх опанування на належному рівні:

- результати навчання 1.1 – 1.6 [знання] – до 36;
- результат навчання 2.1 [вміння] – до 14;
- результат навчання 3.1-3.2 [комунікація] – до 5%;
- результат навчання 4.1 [автономність та відповідальність] – до 5%;

Форми оцінювання:

- **семестрове оцінювання:** Навчальний семестр має два змістовні модулі. Після кожного модуля проводяться письмові модульні контрольні роботи. Обов'язковим для допуску до іспиту є написання модульної контрольної не нижче, ніж 20 балів
- **підсумкове оцінювання (у формі іспиту):** форма іспиту – письмова з 3 питань, питання оцінюються до 14 балів. Всього за іспит можна отримати від 0 до 40 балів. Умовою досягнення позитивної оцінки за дисципліну є отримання не менш ніж 60 балів.
- **умови допуску до іспиту:** умовою допуску до іспиту є отримання студентом сумарно не менше, ніж *критично-розрахунковий мінімум* за семестр. Студенти, які протягом семестру сумарно набрали меншу кількість балів, ніж критично-розрахунковий мінімум **40 балів**, для одержання допуску до іспиту обов'язково повинні виконати необхідну кількість індивідуальних завдань.

У випадку відсутності студента з поважних причин відпрацювання та перездачі модульних контрольних робіт здійснюються у відповідності до „Положення про організацію освітнього процесу у Київському національному університеті”

### 7.2. Організація оцінювання;

Оцінювання за формами контролю:

| Семестрова робота    | Кількість балів |      |
|----------------------|-----------------|------|
|                      | Min.            | Max. |
| Модульний контроль 1 | 17              | 30   |
| Модульна контроль 2  | 18              | 30   |

Орієнтований графік оцінювання:

| Форма оцінювання               | Орієнтовний період для здійснення відповідної форми оцінювання |
|--------------------------------|--|
| Модульний контроль 1           | жовтень  |
| Модульна контроль 2            | грудень  |
| Добір балів/додаткові завдання | грудень  |
| Іспит                          | грудень  |

Розрахунок балів, які отримують при успішній здачі іспиту:

| Значення | Змістовні модулі | Залік | Підсумкова оцінка |
|----------|------------------|-------|-------------------|
| Мінімум  | 40               | 20    | 60                |
| Максимум | 60               | 40    | 100               |

### 7.3. Шкала відповідності оцінок

| Оцінка (за національною шкалою) / National grade | Рівень досягнень, % / Marks, % |
|--|--------------------------------|
| <b>Відмінно</b> / Excellent                      | 90-100%                        |
| <b>Добре</b> / Good                              | 75-89%                         |
| <b>Задовільно</b> / Satisfactory                 | 60-74%                         |
| <b>Незадовільно</b> / Fail                       | 0-59%                          |

### 8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекційних занять

| № з/п         | Назва теми   | Кількість годин |                   |
|---------------|--|-----------------|-------------------|
|               |  | Лекції          | Самостійна робота |
| 1             | Вступ, задачі курсу, теорія Хартрі-Фока  | 6               | 6                 |
| 2             | Основні квантово-хімічні задачі  | 2               | 2                 |
| 3             | Врахування електронної кореляції   | 4               | 4                 |
| 4             | Розрахунок фізичних, хімічних та інших характеристик на молекулярному рівні  | 2               | 2                 |
| 5             | Напівемпіричні методи  | 2               | 2                 |
| 6             | Молекулярна динаміка і докінг  | 2               | 2                 |
| 7             | Фізико-хімічні, структурні та електродинамічні властивості води.   | 2               | 2                 |
| 8             | Структура та характеристики клатратних гідратів та їх використання для транспортування в біосистемах окремих молекул та комплексів | 2               | 2                 |
| 9             | Вплив води на взаємодію атомів, йонів та біомолекул, а також на процеси ділення клітин і реплікацію ДНК                            | 4               | 4                 |
| 10            | Методи генної інженерії та принципи і системи контрольованого зовнішнього впливу на мутацію ДНК                                    | 2               | 2                 |
| 11            | Фізичний механізм та методи впливу водного середовища на ефективність дії селективних біомембран                                   | 2               | 2                 |
| <b>Всього</b> |  | <b>30</b>       | <b>30</b>         |

Загальний обсяг **90** год., в тому числі:

Лекції **30** год.

Самостійна робота **60** год.

## **9. Рекомендована література:**

### **Основні джерела:**

1. A. Szabo, N. S. Ostlund Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. Dover Publications, 1996, 465 pp.
2. K. Burk. The ABC of DFT. <http://dft.rutgers.edu/kieron/beta> cit. 01.05.2008
3. H. Bruus, K. Flensberg Many-body Quantum Theory In Condensed Matter Physics. - Oxford Univ Pr. – 2004, 435 pp.
4. В.І.Висоцький: Квантова механіка та її використання в прикладній фізиці. Підручник.- Видавництво Київського національного університету ім.Т.Г.Шевченка, Київ - 2008, 366 с.
5. V.I.Vysotskii, I.V.Smirnov, A.A.Kornilova. Introduction to the Biophysics of Activated Water - Universal Publishers, Boca Raton, Florida, USA - 2005, 160 p.
6. V.I.Vysotskii, A.A.Kornilova, I.V.Smirnov. Applied biophysics of activated water (the physical properties, biological effects and medical applications of MRET activated water) - World Scientific Publishing - 2009, 317 p.

### **Додаткові і джерела:**

1. GROMACS manual <ftp://ftp.gromacs.org/pub/manual/manual-3.3.pdf> cit. 01.05.2008
2. Кононов М.В., Радченко С.П., Судаков О.О., Мисник А.В. Моделювання фізичних процесів: Методичні вказівки до проведення практичних занять Київ, ВПЦ “Київський університет”, 2006, 91 pp.