

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ**

ЗАТВЕРДЖЕНО

Вченою радою

Інституту органічної хімії НАН України

протокол № 18

від « 07 » 12 2020 року

Голова Вченої ради

органічної хімії НАН України

акад. В.І. Кальченко



2020р.

**РОБОЧА ПРОГРАМА З ДИСЦИПЛІНИ
«ІНТЕРНЕТ-ТЕХНОЛОГІЇ В ХІМІЧНИХ
ДОСЛІДЖЕННЯХ ТА ПРИКЛАДНА КОМП'ЮТЕРНА
ХІМІЯ»**

**для аспірантів третього науково-освітнього рівня
спеціальності 102-«Хімія», спеціалізація «Органічна хімія»,
галузь знань 10 – природничі науки**

Число кредитів ЄКТС – 3

Лекцій – 18 годин

Практичних занять – 8 годин

Самостійна робота – 58 годин

Консультації – 6 годин

Форма контролю знань – іспит

Київ - 2020


Робоча програма з дисципліни «Інтернет-технології в хімічних дослідженнях та прикладна комп'ютерна хімія»

за спеціальністю 102 – хімія, галузь знань 10 – природничі науки для аспірантів третього науково-освітнього рівня

28 11, 2020 р. – 17с.

Розробники:

Д.М. Волочнюк, д.х.н., проф.,


(підпис)

Програму затверджено на засіданні Вченої ради

Інституту органічної хімії НАН України

протокол № 18 від «07» 12 2020 року

Вчений секретар

к.х.н.



В.С. Нікітченко

ПЕРЕДМОВА

Навчальна дисципліна «Інтернет-технології в хімічних дослідженнях та прикладна комп'ютерна хімія» є однією з базових у підготовці фахівців в галузі хімії, оскільки дає можливість аспірантам зі спеціальності «Хімія» опанувати навички праці оптимізованої до сучасних потреб, навчитися пошуку необхідної інформації та проводити базові експерименти *in silico*. Вивчення даної дисципліни передбачає засвоєння універсальних компетентностей, уміння комплексного вирішення питання, збирати і опрацювати інформацію, аналізувати і візуалізувати одержані результати.

Soft Skills – технології і, як засіб їх реалізації, інформаційні технології (ресурси) і Інтернет нині є невід'ємною складовою суспільних відносин, які в подальшому значною мірою будуть визначати соціальний розвиток людства. Сучасна якість навчання і професійної діяльності фахівця вже зараз залежить від вміння користуватися інформаційними технологіями, Інтернет-ресурсами, програмним забезпеченням, які відкривають можливість доступу до нетрадиційних джерел інформації, підвищують ефективність самостійної роботи, дозволяють швидко адаптуватись до нових умов навчання, праці, комунікації.

Предметом вивчення навчальної дисципліни є Soft Skills (м'які універсальні навички та інформаційно-комунікативні технології), протиставлені жорстким вузькопрофесійним навичкам, які допомагають особистісному постійному розвитку та швидкій адаптації до нових умов існування.

Міждисциплінарні зв'язки. Навчальна дисципліна «Інтернет-технології в хімічних дослідженнях та прикладна комп'ютерна хімія» є однією з базових, яка входить в цикл загальної підготовки аспірантів зі спеціальності «Хімія» впродовж третього семестру другого року навчання аспірантів.

Програма навчальної дисципліни складається з двох змістовних модулів:

1. Технології Soft Skills у використанні інтернет-технологій для пошуку хімічної інформації
2. Програмне забезпечення у професії хіміка-органіка

На вивчення навчальної дисципліни відводиться 90 годин / 3 кредити ЕКТС.

1. Мета та завдання навчальної дисципліни

1.1. Метою дисципліни є ознайомлення аспірантів з сучасними програмними комплексами для пришвидшення та полегшення роботи вчених у виконанні наукових досліджень, визначення вектору наукової праці та актуальності теми, формування у аспірантів навичок пошуку інформації для написання статей та оформлення патентів з максимальною вірогідністю цитування та включення у реферативні бази.

1.2. Завданням дисципліни є опанування знання щодо використання програмного забезпечення для пошуку інформації, категоризації та виявлення потенційно цікавих речовин.

1.3. У результаті вивчення навчальної дисципліни аспірант повинен:

Знати та розуміти:

- категорії каталогізованої хімічної інформації та особливості їх пошуку;
- методологічні засади збору інформації у статтях та патентах;
- принципи вибору стратегій синтезу потенційних біологічно-активних речовин;
- сучасні методи аналізу хімічних речовин

Вміти:

- користуватись інтернет-ресурсами для пошуку інформації для організації дослідження
- створювати бази даних хімічних речовин та екстрагувати інформацію для оптимізації синтетичних методів
- проводити примітивні докінг-експерименти для забезпечення базових потреб хіміка-синтетика.

Володіти:

- навиками роботи з мережевим програмним забезпеченням, використання його у професійній та дослідницькій діяльності;

- методами роботи з системами пошуку наукових текстів, програм для передбачення фізико-хімічних параметрів

Сформовані компетентності:

- Здатність розв'язувати комплексні проблеми в галузі професійної дослідницько-інноваційної діяльності, що передбачає глибоке переосмислення наявних та створення нових цілісних знань та/або професійної практики. Розв'язувати складні наукові задачі та проблеми, включно з прийняттям рішень щодо відбору даних та вибору методів досліджень для вивчення природничих наук у різних просторово-часових масштабах із використанням комплексу міждисциплінарних даних, в умовах глобальної інформатизації.

- Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях. Набуття гнучкості мислення, відкритого для застосування набутих хімічних знань для вирішення стратегічних та поточних завдань промислового розвитку, а також для застосування набутих знань у практичних ситуаціях.

- Комунікаційні навички. Здатність до спілкування з різними цільовими аудиторіями, представляти складну інформацію у зручний та зрозумілий спосіб, презентації результатів власного дослідження усно і письмово, використовуючи відповідну лексику, методи, інформаційно-комунікаційні технології та технічні засоби.

- Здатність до пошуку, оброблення на аналізу інформації з різних джерел.

- Здатність генерувати нові науково-теоретичні та практично спрямовані ідеї (креативність).

- Уміння використовувати відповідне програмне забезпечення для проведення хімічних досліджень.

- Здатність виконувати оригінальні дослідження та досягати наукові результати, які створюють нові знання і розуміння у хімічній галузі з актуальних задач/проблем із необхідним застосуванням новітніх наукових методів.

Програмні результати навчання:

- Знання і вміння використовувати сучасні інформаційні та комунікаційні технології, комп'ютерні засоби та програми при проведенні наукових досліджень.

- Знання методів наукових досліджень та вміння їх використовувати на належному рівні; вміння розшукувати, опрацьовувати, аналізувати та синтезувати отриману інформацію (наукові статті, науково-аналітичні матеріали, бази даних тощо).

- Вміння робити пошук та огляд інформації в фаховій літературі з використанням різноманітних ресурсів: журналів, он-лайн ресурсів, вміння працювати з сучасними бібліографічними і реферативними базами даних, а також наукометричними платформами.

- Оволодіння методами роботи із основними базами даних хімічної інформації та компютерних інформаційних технологій в області органічної хімії.

- Компетентне оволодіння сучасними методами хемоінформатики та медичної хімії

2. Опис навчальної дисципліни

Галузь знань, напрям підготовки, спеціальність, освітньо-кваліфікаційний рівень	
Галузь знань	10 Природничі науки
Спеціальність	102 Хімія
Рівень вищої освіти	Третій (освітньо - науковий)
Характеристика навчальної дисципліни	
Вид	Цикл дисциплін загальної підготовки
Загальна кількість годин	90
Кількість кредитів ECTS	3
Кількість змістових модулів	2
Курсовий проект (робота) (якщо є в робочому навчальному плані)	-
Форма контролю	іспит
Показники навчальної дисципліни для денної та заочної форм навчання	
	денна форма навчання
Рік підготовки	2
Семестр	3
Лекційні заняття	18 год.
Практичні, семінарські заняття	8 год.
Самостійна робота	58 год.
Консультації	6 год
Індивідуальні завдання	-

3. Інформаційний обсяг навчальної дисципліни ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 1.

Технології Soft Skills у використанні інтернет-технологій для пошуку

хімічної інформації

Тема 1. Вступ. Історія розвитку засобів збору інформації у хімії.

Історичні відомості про формат збору інформації та розвиток систем каталогізації наукового знання. Молекулярні редактори та формати роботи з ними. SMILES, SMARTS та InChI.

Тема 2. Реферативні бази даних. Структура статей та патентів.

Пошук у Reaxys, SciFinder, Spresi. Методи роботи, спільні елементи на відмінності. Розвиток цих баз на особливості структури вихідних довідників.

Тема 3. Інформація про біологічну активність для хіміка-органіка.

Робота з БД Reaxys з екстракції біологічної інформації для досліджень.
DrugBank – база лікарських засобів.

Тема 4. Розширений пошук наукової інформації.

База Web of Science, створення бібліографії, аналіз отриманих результатів, пошук журналів у Journal Citation Reports, Essential Science Indicators та інших.

Тема 5. Менеджери цитувань.

Mendeley, Zotero, EndNote, Jabref. Особливості використання та ліцензії.

ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 2.

Програмне забезпечення у професії хіміка-органіка

Тема 6. Молекулярні редактори.

Avogadro, ChemAxon Marvin, PerkinElmer ChemDraw. Базові операції та можливості програм для використання у різних типах завдань.

Тема 7. Створення комбінаторних бібліотек за допомогою програмного пакету ChemAxon Instant jChem.

Імпорт та експорт хімічних структур. Генерування комбінаторних бібліотек для докінгу, фармакофорних та QSAR-досліджень з набору доступних вихідних речовин.

Тема 8. Розрахункові методи в хімії. Особливості та сфери застосування. Докінг, квантові розрахунки, віртуальний скринінг.

Підготовка ліганду та субстрату. Докінг на субстраті. Візуалізація та аналіз отриманих результатів.

Тема 9. Програмне забезпечення для роботи у лабораторії.

Електронні лабораторні журнали та програми для обробки спектральної інформації.

4. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин				
	усього	у тому числі			
		Лекції	Практичні	Самостій на робота	Консультації
1	2	3	4	5	7
Змістовий модуль 1. <i>Технології Soft Skills у використанні інтернет-технологій для пошуку хімічної інформації</i>					
Тема 1. Вступ. Історія розвитку засобів збору інформації у хімії.	7	2		4	1
Тема 2. Реферативні бази даних. Структура наукових паперів.	8	2		5	1
Тема 3. Інформація про біологічну активність для хіміка-органіка.	10	2	2	5	1
Тема 4. Розширений пошук наукової інформації.	10	2	2	6	
Тема 5. Менеджери цитувань.	10	2		8	
<i>Разом за змістовим модулем 1</i>	45	10	4	28	3
Змістовий модуль 2. <i>Програмне забезпечення у професії хіміка-органіка</i>					
Тема 6. Створення комбінаторних бібліотек за допомогою програмного пакету ChemAxon Instant jChem.	13	2	2	8	1
Тема 7. Докінг до молекули протеїну.	13	2	2	8	1
Тема 8. Віртуальний скринінг .	9	2		7	
Тема 9. Програмне забезпечення для роботи у лабораторії.	10	2		7	1
<i>Разом за змістовим модулем 2</i>	45	8	4	30	3
Усього годин	90	18	8	58	6

5. Теми практичних занять.

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Пошук у базах даних Reaxys, SciFinder та Drugbank	2
2	Пошук у базах Web of Science та Scopus.	2
3	Побудування баз даних комбінаторних бібліотек за допомогою Instant JChem	2
4	Проведення докінг-експерименту	2
Разом:		8

6. Тематика самостійної роботи.

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1.	Робота з редакторами файлів з даними про молекули	4
2.	Літературний пошук у базах Reaxys, SciFinder та Spresi	5
3.	Пошук інформації про лікарські засоби та протеїни-цілі у медичній хімії	5
4.	Літературний пошук у базі Web of Science	6
5.	Створення бібліографії у програмі Mendeley	8
6.	Створення комбінаторної бібліотеки у програмі Instant JChem	8
7.	Проведення докінга у програмі Autodock	8
8.	Віртуальний скринінг у Instant JChem	7
9.	Створення лабораторного журналу у Indigo ELN	7
Разом у першому семестрі:		58

7. Додаткова робота

Вид індивідуальних завдань	Тематика індивідуальних завдань	Всього годин
Реферат	Реферативні бази хімічної інформації	30
	Докінг у пошуку потенційних ліків	
	Симуляції у комбінаторній хімії	
	Експеримент та його нотування	

8. Методи навчання

Форми навчання: теоретичні, практичні, самостійна робота, консультації

Методи навчання:

словесні – лекція, пояснення, бесіда;