

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Інститут високих технологій

Кафедра нанofізики конденсованих середовищ



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник директора
з навчальної роботи

Грабчук Г.П.

«24» травня 2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Хемоінформатика

(повна назва робочої дисципліни)

для студентів

галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	105 Прикладна фізика та наноматеріали
освітній рівень	Бакалавр
освітня програма	Нанofізика та комп'ютерні технології
вид дисципліни	вibіркова

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2023/2024
Семестр	8
Кількість кредитів ECTS	4
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	залік

Розробники: Рябухін С. В., д. х. н. професор кафедри супрамолекулярної хімії

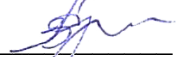
Пролонговано: на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.
на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.

КИЇВ – 2022

Розробники: Рябухін С. В., д. х. н. професор кафедри супрамолекулярної хімії

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри нанофізики конденсованих середовищ


_____ Валерій Скришевський

Протокол № 5 від «19» квітня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією інституту високих технологій

Протокол від «13» травня 2022 року № 4

Голова науково-методичної комісії



Русінчук Н. М.

ВСТУП

Навчальна дисципліна «Хемоінформатика» є складовою освітньої програми підготовки фахівців за освітнім рівнем «бакалавр» галузі знань 10 «Природничі науки» зі спеціальності 105 «Прикладна фізика та наноматеріали» освітньої програми «Нанофізика та комп'ютерні технології».

Дана дисципліна входить у блок вільного вибору студента «Комп'ютерні технології в природничих науках»

Викладається у 8 семестрі (4 року навчання) в обсязі 120 год. (4 кредитів ECTS) зокрема: лекції – 30 год., семінарських 14, самостійна робота – 78 год. Дисципліна завершується іспитом.

1. Мета дисципліни – ґрунтовне вивчення причин просторової будови, структурно-динамічних властивостей основних класів низькомолекулярних сполук та біополімерів методами сучасних розрахункових фізико-хімічних методів досліджень.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

- 1. Знати основні поняття теорії квантової механіки, основи хімії низькомолекулярних сполук та полімерів, основні закономірності курсів молекулярної фізики, оптики, електрики, атомної та ядерної фізики.*
- 2. Вміти застосовувати основні методи прикладної квантової механіки та хімії для розрахунку типових задач, що мають аналітичні розв'язки.*
- 3. Володіти основним апаратом лінійної алгебри та тензорним аналізом, основами програмування та алгоритмізації.*

3. Анотація навчальної дисципліни:

Навчальна дисципліна " Хемоінформатика " розглядає необхідні алгоритми, методи та програмні комплекси для вирішення задач. Предметом навчальної дисципліни є вивчення структурно-динамічних властивостей низькомолекулярних сполук та основних класів біополімерів сучасними розрахунковими методами. У курсі детально розглядаються найбільш поширені підходи до вивчення просторової будови, структурно-динамічних властивостей низькомолекулярних сполук, основних класів біополімерів, їхніх основних фізико-хімічних підвалин функціонування та конформаційних змін методами *ab initio*.

4. Завдання (навчальні цілі):

Навчання дисципліні має на меті розвинути у студентів такі загальні та фахові компетентності:

ЗК01. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК02. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.

ЗК03. Здатність спілкуватися державною мовою як усно так і письмово.

ЗК07. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

ЗК09 Здатність працювати автономно.

ЗК14 Здатність бути критичним і самокритичним.

ЗК16 Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт.

ЗК17 Здатність спілкуватися з представниками інших професійних груп різного рівня (з експертами з інших галузей знань/видів економічної діяльності).

ФК1 Здатність брати участь у плануванні та виконанні наукових та науково-технічних проектів.

ФК5 Здатність до постійного розвитку компетентностей у сфері прикладної фізики, інженерії та комп'ютерних технологій.

ФК6 Здатність використовувати сучасні теоретичні уявлення в галузі фізики для аналізу фізичних систем.

ФК7 Здатність використовувати методи і засоби теоретичного дослідження та математичного моделювання в професійній діяльності.

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 (проміжний контроль)
Код	Результат навчання			
1.1	Знати та вміти моделювати будову, структурно-динамічні властивості низькомолекулярних сполук та біополімерів: нуклеїнових кислот та білків, Знати сучасні фізико-хімічні розрахункові методи. Ознайомлення зі спеціальним програмним забезпеченням для розрахунків або оцінювання необхідних параметрів низькомолекулярних сполук та біополімерів. Вивчення основ ОС Linux та реалізація алгоритмів.	Лекції, самостійна робота студентів.	контрольні роботи,	10
1.2	Знати Основні технології, особливості формування баз даних та систем пошуку.	Лекції, самостійна робота студентів.	контрольні роботи,	15
1.3	Знати Основні моделі та теорії, що описують молекулярні системи	Лекції, самостійна робота студентів.	контрольні роботи,	10
2.1	Вміти застосовувати спеціальне програмне забезпечення для розрахунків або оцінювання необхідних параметрів низькомолекулярних сполук та біополімерів. Опису їхніх конформаційних змін та основ функціонування. Вивчення основ ОС Linux та реалізація алгоритмів.	лекційні заняття, консультації, практичні	контрольні роботи,	15
2.2	Розраховувати представлення тривимірних структур. Створення 3D структур	лекційні заняття, консультації, практичні	контрольні роботи,	10
2.3	Розраховувати кількісні співвідношення структура- властивість використовуючи прогностичні моделі	лекційні заняття, консультації, практичні	контрольні роботи,	15
3.1	здатність виділяти суть питання, формулювати лаконічну та вичерпну відповідь, чітко формулювати запитання, вести професійну дискусію.	лекційні заняття, консультації		15
4.1	Приймати та обґрунтувати рішення щодо вибору типу моделі, підходів моделювання та програмного комплексу для описання фізичних, біологічних чи хімічних процесів, у тому числі, складних систем.	Самостійна робота	письмові модульні контрольні роботи, оцінювання виконання завдань для самостійної роботи	5

4.2	Розробляти та формулювати свої професійні висновки та розумно їх аргументувати для фахової та нефахової аудиторії.	Самостійна робота		5
-----	--	-------------------	--	---

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання (необов'язково для вибіркових дисциплін які не входять до блоків спеціалізації)

Результати навчання дисципліни (код)								
Програмні Результати навчання (назва)	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	1.3	1.4
ПРН1. Знати і розуміти сучасну інформатику на рівні, достатньому для розв'язання складних спеціалізованих задач і практичних проблем хеміінформатики. Розв'язувати складні задачі в галузі біології, генерувати та оцінювати ідеї.	+			+	+	+	+	
ПРН4. Аналізувати біологічні явища та процеси на молекулярному, клітинному, організменному, популяційно-видовому та біосферному рівнях з точки зору фундаментальних загальнонаукових знань, а також за використання спеціальних сучасних методів досліджень.		+	+		+	+		+
ПРН14. Організувати результативну роботу індивідуально і як член команди		+		+	+		+	
ПРН15. Розробляти та формулювати свої професійні висновки та розумно їх аргументувати для фахової та нефахової аудиторії.	+			+	+		+	+
ПРН16. Моделювати об'єкти і процеси у живих організмах та їхніх компонентах із використанням математичних методів й інформаційних технологій.			+		+		+	
ПРН 19 Вибірковий блок 1: На основі отриманих знань проектувати електронні прилади та програмне забезпечення для потреб нанотехнологій.				+	+	+	+	+
ПРН 20 Вибірковий блок 1: Діагностувати та удосконалювати існуючі електронні прилади та прикладні комп'ютерні програми, що використовуються в природничих науках.				+	+	+	+	+

7. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання студентів: (зазначається перелік видів робіт та форм їх контролю) оцінювання за результатами теоретичного та практичного навчання з застосуванням модульно-рейтингової системи, основною одиницею оцінювання – є бали з пороговим рівнем позитивної оцінки у підсумковому результаті

- семестрове оцінювання:

1. Модульна контрольна робота 1 – РН 1.– 20 балів/ 12 балів
2. Модульна контрольна робота 2 – РН 1.– 20 балів/ 12 балів

3. Практичні та семінари – РН 2, 3. – 12 балів/ 7 балів

4. Проміжне тестування РН 4. – 8 балів/ 5 балів

- підсумкове оцінювання: у формі заліку

Формою проведення іспиту є тестова контрольна робота. Результатами навчання, які оцінюються в тестовій контрольній роботі, є РН 1.. Максимальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом, становить 40 балів. Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за залік не може бути меншою 24 балів; Студент не допускається до заліку, якщо під час семестру набрав менше ніж 20 балів (рекомендований мінімум 36 балів).

7.2 Організація оцінювання:

Протягом семестру студенти виконують практичні роботи, за результатами чого готують письмові та усні звіти.

Протягом семестру студенти працюють над виконанням самостійної роботи, необхідні знання та навички для виконання якої отримують під час лекційних та практичних занять. Результатом виконання самостійної роботи є висновки та аналіз практичних робіт.

Для студентів, які упродовж семестру не досягли мінімального рубіжного рівня оцінки (36 балів), для одержання допуску до заліку обов'язковим є виконання додаткових завдань.

7.3. Шкала відповідності оцінок

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

8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій та семінарських занять

№ п/п	Назва теми*	Кількість годин		
		лекції	практичні заняття	самостійна робота
Назва розділу чи частини 1(якщо здійснюється поділ)				
1	Вступ. Тема 1 Обчислювальна хімія як наука. Предмет і головні задачі обчислювальної хімії. Об'єкти досліджень обчислювальної хімії. Програмні пакети, що дозволяють реалізовувати дослідження в області обчислювальної хімії. Основи ОС Linux, алгоритми, командний рядок. Практичне заняття: «Знайомство з допоміжним програмним забезпеченням (пз) gaussview та chemcraft, формування завдань для розрахунків»	4	2	10

2	<p>Тема 2. Міжмолекулярні взаємодії і сили, які стабілізують низькомолекулярні сполуки та основні класи біополімерів. Методи вивчення міжмолекулярних взаємодій. емпіричні потенціали міжчастинкової взаємодії.</p> <p>Практичне заняття: «Розрахунки енергії та оптимізація молекул отриманих в лб № 1»</p>	4	2	11
3	<p>Тема 3. <i>Ab initio</i> моделювання низькомолекулярних сполук та основних класів біополімерів. Методи квантово-хімічного моделювання. ППЕ та коливальний аналіз.</p> <p>Практичне заняття: «Розрахунки енергії дисоціації двохатомних молекул та енергії зв'язків багатоатомних молекул»</p>	4	2	12
4	<p>Тема 4. <i>Базисні функції. Різновиди квантово-хімічних методів. Програмні реалізації квантово-хімічного моделювання.</i></p> <p>Практичне заняття: «Побудова молекулярних орбіталей молекул»</p>	6	2	11
5	<p>Тема 5. <i>Перехідні стани, пошук та опис: дослідження за прикладі пакету - Gaussian властивостей молекул та реакцій в газовій фазі та розчині, шляхи протікання реакцій.</i></p> <p>Практичне заняття: «Сканування поверхні потенційної енергії»</p>	4	2	10
6	<p>Тема 6. <i>Внутрішньомолекулярне та міжмолекулярне зв'язування. Теорія атомів у молекулах.</i></p> <p>Практичне заняття: «Розрахунок порядку зв'язків деяких вуглеводнів»</p>	4	2	10
7	<p>Тема 7. <i>Дослідження збуджених станів, конфігураційних простір, ППЕ збуджених станів, дисоціація та молекулярні орбіталі.</i></p> <p>Практичне заняття: «Розрахунок шляхів хімічних реакцій»</p>	4	2	12
8	ВСЬОГО	30	14	76

Загальний обсяг 120 год., в тому числі:

Лекції – 30 год

Семінари– 14 год.

Самостійна робота -76год.

Рекомендовані джерела:

Основна:

1. Andreas Bender Jean-Loup Faulon. Handbook of Chemoinformatics Algorithms. Taylor & Francis, June 29, 2010. 454 pp.
2. Beatriz Scaglia. The Fundamentals: An Understanding of Cheminformatics. BiblioBazaar, 2011. 140 pp.
3. Давидовська Т.Л., Цимбалюк О.В., Войтешенко І.С., Грабчук Г.П. та ін. Фізика біосистем, КОМПРИНТ, 2016
4. Вакарчук І. О. Квантова механіка : підручник / І. О. Вакарчук. 4-те вид., доп. Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2012. 872 с
5. Foresman J. B. Exploring chemistry with electronic structure methods. 2-nd edition / J. B. Foresman, Æ. Frisch. – Gaussian, Inc., Pittsburg, PA, 1996. – 302 p.
6. J. B. Foresman and Æ Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, 3rd ed., Gaussian, Inc.: Wallingford, CT, 2015. ISBN: 978-1-935522-03-4
7. Richard Bader. Atoms in Molecules: A Quantum Theory. — USA: Oxford University Press, 1994. — ISBN 978-0-19-855865-1.
8. J. Gasteiger. Handbook of Cheminformatics: From Data to Knowledge in 4 Volumes. Wiley-VCH, 2003. 1870 pp.
9. Riccardo Baron. Computational Drug Discovery and Design. Humana Press, 2011. 628 pp.
10. Shayne Cox Gad. Development of Therapeutic Agents Handbook. J.Wiley & Sons, 2011. 1232 pp.

Додаткова:

1. The official Gaussian website <http://www.gaussian.com/index.htm>
2. The official ORCA <http://website.orcaforum.kofo.mpg.de>
3. The official AIMALL website <http://aim.tkgristmill.com>
4. The official GAMESS website <https://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/>
5. The official MULTIWFN website <http://sobereva.com/multiwfn/>
6. Ochterski Joseph W. Thermochemistry in Gaussian. Gaussian, Inc. 2000 –19 p.
7. The Linux Documentation Project <http://www.tldp.org/>
8. Shayne Cox Gad. Drug Discovery Handbook. John Wiley & Sons, July 8, 2005. 1000 pp.
9. Thomas Engel Johann Gasteiger, ed. Cheminformatics: A Textbook. 2003. isbn: 978-3527306817.
10. Andreas Bender Rajarshi Guha. Computational Approaches in Cheminformatics and Bioinformatics. Wiley, 2011. 288 pp.