

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Навчально науковий інститут високих технологій

кафедра супрамолекулярної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»
Заступник декана
з навчальної роботи
Грабчук Г.П.
«___» _____ 2022 року



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Хімічне різноманіття в хімічних базах даних

для студентів

галузь знань 10 Природничі науки
спеціальність **102 Хімія**
освітній рівень **магістр**
освітня програма **Високі технології (Хемоінформатика)**
вид дисципліни **вибіркова**

Форма навчання	<u>денна</u>
Навчальний рік	<u>2022/2023</u>
Семестр	<u>третій</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>5</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<u>українська</u>
Форма заключного контролю	<u>залік</u>

Викладач: д.х.н., проф. Волочнюк Д.М.

Пролонговано: на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» ____ 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» ____ 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

КИЇВ – 2022

Розробник: д.х.н., проф. Волочнюк Д.М.

ЗАТВЕРДЖЕНО:

Зав. кафедри супрамолекулярної хімії


_____ (Рябухін С.В.)

Протокол №7 від «19» серпня 2022 року

Схвалено науково - методичною комісією Інституту високих технологій

Протокол №1 від «9» вересня 2022 року

Голова науково-методичної комісії _____  (Русінчук Н. М.)

ВСТУП

1. Мета дисципліни :

Метою даного курсу є формування у студентів ставлення до Інтернету як до рутинного інструменту навчальної та наукової діяльності. Завданням даної дисципліни є вироблення навичок осмисленої роботи з найбільш важливими онлайн-інформаційними ресурсами та пошуковими інструментами, у відпрацюванні прийомів оцінки достовірності документів. В цій програмі більш поглиблено викладаються практичні аспекти, теоретичне знайомство з якими студенти отримують у обов'язковому курсі «Управління базами даних та веб-технології в хімії»

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни :

Студент повинен знати:

фундаментальні основи загальної, неорганічної та органічної хімії, біохімії, молекулярної біології, фізичної хімії та супрамолекулярної хімії, а також основ фізичних методів дослідження.

Студент повинен вміти:

Користуватися сучасними електронними базами даних в галузі хімії і біології, іншими Інтернет-ресурсами.

3. Анотація навчальної дисципліни

Курс поділений на дві частини. У першій частині проводиться навчання студентів навичкам роботи з текстовими онлайн-науковими ресурсами: журналами, матеріалами конференцій, дисертаціями, книгами, патентами, нормативними документами, довідниками. Розглядаються правила формулювання текстового запиту, алгоритми вилучення інформації та її аналізу. Другий розділ курсу присвячений роботі зі структурними базами даних. На цьому етапі виробляються навички структурного пошуку, аналізу будови кристалічних та молекулярних хімічних об'єктів, методів вилучення ЯМР-, ІЧ-, мас-спектрів, ідентифікації речовини за його спектральними даними

4. Завдання (навчальні цілі)

Навчання дисципліні має на меті розвинути у студентів такі компетентності:

ЗК1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.

ЗК2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК4. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК6. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).

ЗК7. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології.

ЗК12. Здатність працювати автономно.

ЗК14. Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел.

ФК2. Здатність будувати адекватні моделі хімічних явищ, досліджувати їх для отримання нових висновків та поглиблення розуміння природи, в тому числі з використанням методів молекулярного, математичного і комп'ютерного моделювання.

ФК4. Здатність інтерпретувати, об'єктивно оцінювати і презентувати результати свого дослідження.

ФК5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.

ФК6. Здатність здобувати нові знання в галузі хімії та інтегрувати їх із уже наявними.

ФК8. Здатність формулювати нові гіпотези та наукові задачі в галузі хімії, вибирати напрями та відповідні методи для їх розв'язання на основі розуміння сучасної проблематики досліджень в галузі хімії та беручи до уваги наявні ресурси.

ФК9. Здатність обирати оптимальні методи та методики дослідження.

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	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			
1.	<p>Знати:</p> <ul style="list-style-type: none"> - синтаксис багатокomпонентного текстового запиту; - типову структуру сайту видавництва, наукового журналу, агрегатора наукових статей, патентної бази даних, довідкової бази даних; - типову структуру онлайнової наукової та науково-технологічної публікації - методи інформаційного пошуку на сайтах основних наукових видавництв, у патентних базах даних 	Лекції	Контрольні роботи	30%
2.	<p>Вміти:</p> <ul style="list-style-type: none"> - оцінювати достовірність інформаційного джерела та аналізувати його зміст; - осмислено відбирати коло ресурсів, які, ймовірно, містять потрібну інформацію; - вести цілеспрямований пошук шуканої інформації та оперативно коригувати алгоритм роботи; - формулювати структурний запит для пошуку структурою, субструктурою, за рівнем подібності; - виявляти ЯМР-, ІЧ-, мас-спектри, фізико-хімічні характеристики заданих речовин 	Практичні заняття	Контрольні роботи	50%
3.	<p>Комунікація:</p> <p>3.1. Працювати в групі на семінарах та практичних роботах.</p>	Практичні заняття	Звіти	10%
4.	<p>Автономність та Відповідальність:</p> <p>4.1. Самостійно працювати з науковою та навчально-методичною літературою, здійснювати пошук та узагальнення науково-технічної інформації.</p>	Самостійна робота	Контрольна робота	10%

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Результати навчання дисципліни	Програмні результати навчання	1	2	3	4
P1. Знати та розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.		+	+	+	+
P2. Глибоко розуміти основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються предметної області, опанованої у ході магістерської програми, використовувати їх для розв'язання складних задач і проблем, а також проведення досліджень з відповідного напрямку хімії.		+	+	+	+
P5. Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.		+	+	+	+
P6. Знати методологію та організації наукового дослідження.		+	+	+	+
P8. Вміти ясно і однозначно донести результати власного дослідження до фахової аудиторії та/або нефаківців.				+	
P9. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи відповідні методи та інструменти роботи з даними.		+	+	+	+
P10. Планувати, організувати та здійснювати експериментальні дослідження з хімії з використанням сучасного обладнання, грамотно обробляти їх результати та робити обґрунтовані висновки.		+	+	+	+
P11. Складати технічне завдання до проекту, розподіляти час, організувати свою роботу і роботу колективу, складати звіт.			+	+	+
P13. Аналізувати наукові проблеми та пропонувати їх вирішення на абстрактному рівні шляхом декомпозиції їх на складові, які можна дослідити окремо.		+	+	+	+
P14. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.			+	+	+
P15. Володіння загальною методологією здійснення наукового дослідження.		+	+	+	+

7. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання:

- семестрове оцінювання:

1. Модульна контрольна робота 1 – РН 2. – 12 балів
2. Модульна контрольна робота 2 – РН 2. – 12 балів
3. Модульна контрольна робота 3 – РН 2. – 12 балів
4. Підсумкова контрольна робота – РН 1. – 12 балів
5. Практичний звіт – РН 3. – 6 балів
6. Домашня контрольна робота. – РН 4. – 6 балів

- підсумкове оцінювання: у формі іспиту

Формою проведення іспиту є тестова контрольна робота та співбесіда на основі неї. Результатами навчання, які оцінюються в тестовій контрольній роботі, є РН 1. Максимальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом, становить 40 балів.

- умови допуску до підсумкового іспиту:

Студент допускається до іспиту за умови виконання всіх передбачених планом практичних робіт. Студент не допускається до іспиту, якщо під час семестру набрав менше, ніж 36 балів.

7.2 Організація оцінювання:

Модульні контрольні роботи проводяться після завершення лекцій з відповідних розділів. Проміжне тестування проводиться упродовж лекційного курсу. Оцінювання роботи студента з рішення задач проводиться на практичних заняттях у формі контрольної роботи.

7.3 Шкала відповідності оцінок

Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій та лабораторних занять

№ п/п	Номер і назва теми*	Кількість годин		
		лекції	практичні заняття	самостійна робота
1	Тема 1. Вступ. Узагальнення уявлення про інтернет. Текстова база даних. Структура текстової бази даних: запис, поле, допоміжні покажчики (індекси). Принципова схема пошуку та отримання інформації. Пошуковий процес як посимвольне порівняння тексту завдання з текстами, які у базі даних. Запит (пошукове завдання). Синтаксис запиту. Ранжування списку результатів за рівнем відповідності до пошукового завдання — релевантності.	2		
	Практичне заняття 1. Пошукова система Google. Синтаксис запиту, що формулюється на основному пошуковому бланку. Правила формулювання запиту на ускладненому бланку. Автоматизований переклад		2	

	фрагментів тексту та веб-сторінок за допомогою онлайн-засобів. Мовні інструменти Google.			
	Самостійна робота 1. Пошук відповідної наукової літератури, що стосується кваліфікаційної роботи студента.			10
2	Тема 2. Онлайн-науковий журнал. Сайти видавництва. Науковий журнал як архів наукових знань та як інструмент оцінки якості результатів наукової діяльності. Структура журналу. Типи публікацій у науковому журналі. Наукова стаття. Структура статті. Препрінт, постпрінт. Імпакт-фактори наукових журналів. Індеси цитування. Онлайн-журнали. Ініціатива Open Access. Бібліографічне опис. DOI.	2		
	Практичне заняття 2. Портали ScienceDirect, SpringerLink, Wiley Online Library, Wiley-Blackwell. Сайти видавництв наукових товариств American Chemical Society та Royal Society of Chemistry.		2	
	Самостійна робота 2. Пошук книг, що стосується кваліфікаційної роботи студента.			10
3	Тема 3. Наукові публікації у неперіодичних виданнях. Матеріали конференції. Тези доповідей, розширені тези, презентації, конференції. Дисертація. Автореферат дисертації. Книга: монографія, збірка статей, навчальний посібник. Пошукова система Google Books.	4		
	Практичне заняття 3. Тематичний агрегатори на прикладі PubMed Central..		2	
	Самостійна робота 3. Пошук та аналіз наукової літератури, що стосується кваліфікаційної роботи студента.			10
4	Тема 4. Вторинні джерела інформації Спеціалізована пошукова система Google Scholar. Типи першоджерел, що індексуються пошуковою системою. Відмінність спеціалізованої пошукової системи Google Scholar від універсальної Google: переваги та недоліки. Синтаксис запиту. Структура списку результатів пошуку. Можливість використання Google Scholar для виявлення бібліографічної, реферативної та повнотекстової інформації.	2		
	Практичне заняття 4. Порівняльний аналіз Google Scholar Web of Science та Scopus		2	
	Самостійна робота 4. Пошук та аналіз наукової літератури, що стосується кваліфікаційної роботи студента.			10
5	Тема 5. Патентні бази даних Патентна література Патент, патентна заявка, авторське свідоцтво. Патент як юридичний документ та як джерело наукової інформації. Структура патентного документа: сторінка бібліографічного опису, формула винаходу, опис винаходу. Національні, міжнародні та регіональні патентні бюро. Загальні відомості про процедуру реєстрації винаходу. Основні онлайн-ві	4		

	патентні бази даних. Ускладнений пошуковий бланк: структура, методика формулювання запиту. Синтаксис запиту.			
	Практичне заняття 5. Характеристика обсягу та типу інформації, що міститься у базах даних інформаційного центру Європейського патентного бюро Espacenet. Спеціалізована пошукова система Google Patents Область застосування пошукової системи та порівняння можливостей Google Patents з іншими аналогічними інструментами патентного пошуку.		4	
	Самостійна робота 5. Пошук та аналіз літературних даних що є в патентах та стосується кваліфікаційної роботи студента.			10
6	Тема 6. Текстовий та числовий пошук у довідкових базах даних. Довідкові бази даних, що містять відомості про фізичні та хімічні властивості хімічних речовин, сумішей, матеріалів. Бази даних NIST Chemistry WebBook та Maugr's Database Of Reactivity Parameters	4		
	Практичне заняття 6. Сертифікати безпеки матеріалу (MSDS). Характеристика достовірності інформації, що є у сертифікаті. Онлайн бази даних, що містять MSDS.		2	
	Самостійна робота 6. Аналіз безпеки речовин з якими працює студент			10
7	Тема 7. Комерційна доступність хімічних речовин. Каталог хімічних реактивів. Методика пошуку відомостей про реактив та про фірму-виробника. Критерії визначення оптимальної ціни реактиву. Структурний пошук. Метабази даних про реактиви	2		
	Практичне заняття 7. Реєстраційні номери хімічних речовин, які у великих базах даних. CAS Registry Number: алгоритм нумерації хімічних об'єктів формат запису. Проблема співвідношення коду та речовини. Онлайн та офлайн джерела інформації про CAS RN. Використання CAS RN в інформаційному пошуку.		2	
	Самостійна робота 7. Оцінка субівартості реактивів, що використав студент при виконанні своєї роботи.			10
8	Тема 8. Спектральні бази даних. Онлайн репозиторії спектральних даних. Інформаційний пошук у спектральних базах даних та аналіз результатів. ChemSpider як онлайн центр структурної інформації. База даних SDBS та NIST Chemistry WebBook.	4		
	Практичне заняття 8. Методика вилучення спектрів з бази даних SDBS		4	
	Самостійна робота 8. Пошук спектрів у різноманітних базах даних			10
9	Тема 9. Кристалографічні бази даних та візуалізація кристалічних структур Параметри тривимірної моделі структури речовини: координати атомів, кути між зв'язками, торсіонний (двогранний) кут. Способи візуалізації тривимірної структури; дротяна, стрижнева, шарострижнева,	4		

об'ємна (СРК) моделі. Стандарт Міжнародної спілки кристалографії, що регламентує порядок зберігання кристалографічної інформації про низькомолекулярні речовини. Файловий формат CIF. Онлайнні архіви CIF-файлів. Кристалографічна інформація в онлайнних наукових журналах. Cambridge Crystallographic Data Centre			
Практичне заняття 9. Прикладні програми візуалізації та аналізу інформації, що зберігається у CIF-файлах. Прийоми роботи з програмою Mercury		4	
Самостійна робота 9. Робота в команді. Створення підгруп та ієрархій для відображення організаційної структури науково-дослідної установи. Обмін інформацією та спілкування у рамках наукової групи. Обмін нотатками, проектами та протоколами з певними членами команди. Додавання приміток та коментарів до записів.			20

Загальний обсяг 150 год., в тому числі:

Лекції – 28 год.

Практичні – 22 год.

Самостійна робота - 100 год.

9. Рекомендовані літературні джерела:

Основна:

1. Chemical Information for Chemists: A Primer. Edited by Judith N. Currano and Dana L. Roth. - RSC Publishing, Cambridge, UK, 2014
2. TJ O'Donnell Design and Use of Relational Databases in Chemistry CRC Press 2008. <https://doi.org/10.1201/9781420064438>

10. Додаткові джерела та інформація:

1. <https://www.reaxys.com>
2. <https://scifinder.cas.org>
3. <https://www.spresi.com>
4. <https://www.scopus.com>
5. <https://webbook.nist.gov/chemistry/>
6. <https://www.cup.lmu.de/oc/mayr/reaktionsdatenbank/>
7. https://sdfs.db.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/cre_index.cgi
8. <https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures/>

Контрольні запитання до курсу:

1. Методика формулювання текстового запиту для розпізнавання сенсу фрагмента наукової публікації за допомогою пошукової системи
2. Пошук першоджерела наукової інформації за допомогою пошукової системи.
3. Імпакт-фактор журналу
4. Видавництва ACS, RSC, Elsevier, Springer, Wiley – порівняльна характеристика
5. Баз даних агрегаторів J-STAGE, SCIELO, PubMed Central.
6. Reaxys, Scifinder, Spresi - порівняльна характеристика.
7. Трансформувати задану структуру у SMILES.
8. Сформулювати запит субструктурного пошуку за допомогою SMARTS.

9. Історичний вплив Бельштейна та Гмеліна на сучасні реферативні бази.
10. Запропонувати синтез сполуки використовуючи Reaxys та Scifinder.
11. Міжнародні ідентифікатори документа. DOI, ISBN.
12. Структура платформи Web of Science.
13. Алгоритм ефективного пошуку у Web of Science.
14. Формат цитування та його складові частини. Популярні формати цитувань.
15. H-індекс
16. База даних USPTO
17. База даних espacenet
18. Спеціалізована пошукова система Google Patents
19. Сертифікати безпеки матеріалу (MSDS).
20. Бази даних ChemIDplus, ChemSpider, NIST Standard Reference Database – порівняльна характеристика.
21. База даних SDBS
22. База даних Inorganic Crystal Structure Database
23. База даних Crystallography Open Database.