

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Навчально науковий інститут високих технологій

кафедра супрамолекулярної хімії



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник директора
з навчальної роботи

Грабчук Г.П.

2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Управління базами даних та веб-технології в хімії

(повна назва навчальної дисципліни)

для студентів

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

вид дисципліни **обов'язкова**

Форма навчання	<u>денна</u>
Навчальний рік	<u>2022/2023</u>
Семестр	<u>другий</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>6</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:

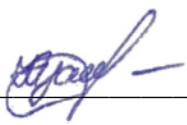
Зав. кафедри супрамолекулярної хімії


_____ (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 :

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

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 направлений на опанування знання щодо використання програмного забезпечення для пошуку інформації, категоризації та виявлення речовин, що цікавлять науковця. Особлива увага в курсі буде приділятися: (а) категоріям каталогізованої хімічної інформації та особливості їх пошуку; (б) методологічним засади збору інформації у статтях та патентах; (в) принципам вибору стратегій синтезу потенційних біологічно-активних речовин; (г) інтернет-ресурсами для пошуку інформації для організації дослідження; (д) базам даних хімічних речовин та методам екстрагування інформації щодо методів їх отримання та властивостей. Крім того в курсі викладається методи збору, зберігання та систематизації отриманих експериментальних даних з використанням електронних лабораторних журналів та програм для обробки спектральних даних. Окремою частиною курсу буде методологічна підготовка студента для пошуку літератури, написання та оформлення літературного огляду його кваліфікаційної роботи.

4. Завдання (навчальні цілі)

Навчання дисципліні має на меті розвивати у студентів такі компетентності:

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

ЗК 6. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).

ЗК7. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології.

ЗК8. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт

ЗК10. Здатність спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою, як усно, так і письмово.

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

ФК3. Здатність організувати, планувати та реалізовувати хімічний експеримент.

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.	Знати: методи збору, зберігання та систематизації отриманих експериментальних даних з використанням електронних лабораторних журналів та програм для обробки спектральних даних	Лекції	Контрольні роботи	20%
2.	Вміти: проводити пошук публікацій щодо заданої тематики, створення бібліографії, систематизувати отримані результати для написання та оформлення літературного огляду кваліфікаційної роботи	Практичні заняття	Контрольні роботи	60%
3.	Комунікація: Працювати в групі на семінарах та практичних роботах.	Практичні заняття	Звіти	10%
4.	Автономність та Відповідальність: Самостійно працювати з науковою та навчально-методичною літературою, здійснювати пошук та узагальнення науково-технічної інформації.	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.	+	+		+
P3. Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення нових якісних та кількісних задач хімії.	+	+		+
P5. Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.	+			
P6. Знати методологію та організації наукового дослідження.	+	+	+	
P7. Вільно спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою з професійних питань, усно і письмово презентувати результати досліджень з хімії іноземною мовою, брати участь в обговоренні проблем хімії.	+	+	+	+
P9. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи відповідні методи та інструменти роботи з даними.	+	+	+	+
P13. Аналізувати наукові проблеми та пропонувати їх вирішення на абстрактному рівні шляхом декомпозиції їх на складові, які можна дослідити окремо.	+	+		+
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. Історія розвитку засобів збору інформації у хімії. Структура статей та патентів. Історичні відомості про формат збору інформації та розвиток систем каталогізації наукового знання.	2		
	Практичне заняття 1. Молекулярні редактори та формати роботи з ними. SMILES, SMARTS та InChI.		2	
	Самостійна робота 1. Пошук відповідної наукової літератури, що стосується кваліфікаційної роботи студента.			8
2	Тема 2. Scopus та Web of Science Бази даних Scopus та Web of Science, їх структура, способи наповнення, схожість та відмінності. Методологія пошуку наукової інформації з використанням цих баз.	4		
	Практичне заняття 2. Пошук публікацій щодо заданої тематики, створення бібліографії, аналіз отриманих результатів, пошук журналів у Journal Citation Reports, Essential Science Indicators та інших.		4	
	Самостійна робота 2. Аналіз цитувань наукової літератури, що стосується кваліфікаційної роботи студента.			16

3	<p>Тема 3. Реферативні бази даних що дозволяють структурний пошук. Reaxys, SciFinder, Spresi. Бази даних Reaxys, SciFinder, Spresi, їх структура, способи наповнення, схожість та відмінності. Методологія пошуку наукової інформації з використанням цих баз.</p>	4		
	<p>Практичне заняття 3. Можливості використання пошукових систем. Валідація даних. Експорт та візуалізація отриманих даних.</p>		4	
	<p>Самостійна робота 3. Пошук та аналіз наукової літератури, що стосується кваліфікаційної роботи студента.</p>			16
4	<p>Тема 4. Бази даних, що містять відомості щодо біологічної активності сполук. Reaxys Medicinal Chemistry, ChEMBL, DrugBank. Бази даних Reaxys Medicinal Chemistry, ChEMBL, DrugBank, їх структура, способи наповнення, схожість та відмінності. Методологія пошуку наукової інформації з використанням цих баз.</p>	4		
	<p>Практичне заняття 4. Види біологічної інформації. Відношення структура-властивість, токсичність, безпечність, ефективність. Пошук оптимальної моделі для дослідження. Підготування звітів з біологічною активністю.</p>		4	
	<p>Самостійна робота 4. Пошук потенційної біологічної активності речовин, що стосується кваліфікаційної роботи студента.</p>			16
5	<p>Тема 5. Розширений пошук наукової інформації. Методологія пошуку інформації з використанням декількох баз даних. Релевантність пошуку. Ранжування великої кількості наукових публікацій (за релевантністю, цитуванням та іншими характеристиками).</p>	4		
	<p>Практичне заняття 5. Обмін даними між різними бібліографічними та реферативними базами даних. RIS, BibTeX, MARC файли.</p>		4	
	<p>Самостійна робота 5. Пошук та аналіз літературних даних що стосується кваліфікаційної роботи студента. Підготовка переліку джерел для написання літературного огляду.</p>			16
6	<p>Тема 6. Менеджери цитувань. Використання менеджерів цитувань Mendeley, Zotero, EndNote, Jabref.</p>	2		
	<p>Практичне заняття 6. Особливості використання та ліцензійні умови Mendeley, Zotero, EndNote, Jabref.</p>		2	
	<p>Самостійна робота 6. Створення особистої бібліотеки в одному з редакторів для написання літературного огляду.</p>			8
7	<p>Тема 7. Молекулярні редактори. Avogadro, ChemAxon Marvin, ChemDraw, ISIS/Draw (як частина BIOVIA Draw). Базові операції та можливості програм для використання у різних типах завдань.</p>	2		
	<p>Практичне заняття 7. Порівняння можливостей молекулярних редакторів. Використання вбудованих стилей для підготовки наукових публікацій для різних видавництв.</p>		2	
	<p>Самостійна робота 7. Підготовка схем та малюнків для літературного огляду у форматі ACS Style.</p>			8
8	<p>Тема 8. 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.</p>	4		
	<p>Практичне заняття 8. Початок роботи з Instant jChem. Умови отримання академічної ліцензії. Перегляд та управління даними. Списки та запити. Співпраця в команді. Імпорт та експорт. Редагування баз даних. Реляційні дані. Хімічні розрахунки та</p>		4	

	прогнози. Хімічні функції. Написання скриптових програм. Поради та рекомендації.			
	Самостійна робота 8. Побудова реляційної форми з нуля. Управління списками та запитами. Будівництво запитів. Аналіз та візуалізація перерахунку реакцій. Імпорт файлів SDF для генерування розрахункових параметрів. Використання Reactor для створення комбінаторних бібліотек речовин. Використання фільтрів для отриманих бібліотек.			16
9	Тема 9. Програмне забезпечення для роботи у лабораторії. Електронні лабораторні журнали та програми для обробки спектральної інформації.	4		
	Практичне заняття 9. Створення, імпорт, зберігання у цифровому форматі експериментальних даних . Складові системи контролю лабораторних записів.		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.			16

Загальний обсяг 180 год., в тому числі:

Лекції – 30 год.

Практичні – 30 год.

Самостійна робота - 120 год.

9. Рекомендовані літературні джерела:

Основна:

1. J. D'Angelo and M. B. Smith Hybrid Retrosynthesis Organic Synthesis Using Reaxys and Scifinder. Elsevier 2015. ISBN 978-0-12-411498-2. <https://doi.org/10.1016/C2010-0-65817-2>
2. TJ O'Donnell Design and Use of Relational Databases in Chemistry CRC Press 2008. <https://doi.org/10.1201/9781420064438>

Додаткова:

1. Mongeon, P., Paul-Hus, A. The journal coverage of Web of Science and Scopus: a comparative analysis. *Scientometrics* 2016, *106*, 213–228. <https://doi.org/10.1007/s11192-015-1765-5>.
2. Jie Li, Judy F. Burnham, Trey Lemley & Robert M. Britton Citation Analysis: Comparison of Web of Science®, Scopus™, SciFinder®, and Google Scholar, *Journal of Electronic Resources in Medical Libraries*, 2010, *7*(3), 196-217, DOI: 10.1080/15424065.2010.505518
3. Ivey, C.; Crum, J. Choosing the right citation management tool: EndNote, Mendeley, RefWorks, or Zotero. *Journal of the Medical Library Association*, 2018, *106* (3), 399–403, doi:<https://doi.org/10.5195/jmla.2018.468>.
4. S. Y Nussbeck, P. Weil, J. Menzel, B. Marzec, K. Lorberg, B. Schwappach The laboratory notebook in the 21st century. *EMBO Rep* 2014, *15*, 631-634. <https://doi.org/10.15252/embr.201338358>.

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://www.drugbank.ca>
6. https://www.daylight.com/dayhtml_tutorials/

Контрольні запитання до курсу:

1. Reaxys, Scifinder, Spresi - порівняльна характеристика.
2. Трансформувати задану структуру у SMILES.
3. Сформулювати запит субструктурного пошуку за допомогою SMARTS.
4. Історичний вплив Бельштейна та Гмеліна на сучасні реферативні бази.
5. Запропонувати синтез сполуки використовуючи Reaxys та Scifinder.
6. Drugbank. Організація роботи з базою та її можливості.
7. Використання Reaxys Medicinal Chemistry для аналізу перспективності кору молекули.
8. Опції фільтрування найбільш перспективних речовин за біологічною активністю.
9. Міжнародні ідентифікатори документа. DOI, ISBN.
10. Структура платформи Web of Science.
11. Індeksi для пошуку у базі Web of Science. Індeksi для хіміка.
12. Алгоритм ефективного пошуку у Web of Science.
13. Формат цитування та його складові частини. Популярні формати цитувань.
14. Mendeley - менеджер цитувань для інтерактивних цитувань у MS Word та LibreOffice.
15. Порівняльний аналіз Mendeley та Zotero.
16. Отримати з вільної для використання бази Drugbank наступну інформацію: комерційні назви, дату затвердження у FDA, перший патент на використання цього діючого засобу, медичну дію та мішень лікарського засобу.
17. Етапи роботи з інтерфейсом СУБД Instant JChem.
18. Формування SQL-запиту на підготовленій БД для фільтрації речовин з заданими характеристиками.
19. Виправити SMILES для молекули, що містить 2 конденсованих кільця, включаючи азот і кисень, що належать різним циклам. Покажіть відповідну 2D структуру
CNNCCOCNCOCCC
20. Визначення переваг InChI перед SMILES?
21. Схарактеризуйте схематично основні етапи синтезу "in silico".
22. Як можна створити комбінаторну бібліотеку зі структури Маркуша? Наведіть приклад.
23. Які типи пошуку структур по хімічним базам даних ви знаєте? Наведіть приклади.