

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Навчально науковий інститут високих технологій

кафедра супрамолекулярної хімії



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник директора
з науково-педагогічної роботи
Галина ГРАБЧУК
«24» травня 2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Інформаційні технології в хімії

(повна назва навчальної дисципліни)

галузь знань 10 Природничі науки **для студентів**
(шифр і назва)
спеціальність **102 Хімія**
(шифр і назва спеціальності)
освітній рівень **бакалавр**
(молодший бакалавр, бакалавр, магістр)
освітня програма **Хімія (Високі технології)**
(назва освітньої програми)
вид дисципліни **обов'язкова**

Форма навчання денна
Навчальний рік 2022/2023
Семестр сьомий
Кількість кредитів ECTS 3
Мова викладання, навчання та оцінювання українська
Форма заключного контролю залік

Викладач: д.х.н., проф. Волочнюк Д.М.

(Науково-педагогічні працівники, які забезпечують викладання даної дисципліни у відповідному навчальному році)

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

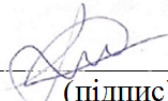
на 20__/20__ н.р. _____ («__» 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

КИЇВ – 2022

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

ЗАТВЕРДЖЕНО:

Завідувач кафедри супрамолекулярної
хімії


_____ Сергій РЯБУХІН
(підпис)

Протокол № 5 від «11» травня 2022р.

Схвалено науково - методичною комісією Інституту високих технологій

Протокол № 4 від «13» травня 2022 року

Голова науково-методичної комісії _____ Наталя РУСІНЧУК
(підпис) (прізвище та ініціали)

ВСТУП

1. Мета дисципліни :

1. Метою дисципліни є навчання студентів релевантному пошуку наукової інформації та роботі з експериментальними даними з первинних джерел. Для цього студенти будуть ознайомлені з рядом бібліографічних та реферативних баз даних, до яких є доступ у мережі інтернету.

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 розвиток навичок пошуку і систематизації наукової літератури з використанням бібліографічних та реферативних баз даних, таких як Scopus, Web of Science, Reaxys та SciFinder. В рамках курсу також буде ознайомлення з наукометриєю та основними наукометричними показниками. 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:

ІК. Здатність розв'язувати складні спеціалізовані задачі і практичні проблеми в галузі хімії, що пов'язані з синтезом, виділенням/розділенням нових наноматеріалів та лікарських засобів, ідентифікацією одержаних речовин із використанням комплексу міждисциплінарних даних. .

ЗК1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК5. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій.

ЗК7. Здатність спілкуватися з представниками інших професійних груп різного рівня (з експертами з інших галузей знань/видів економічної діяльності).

ФК8. Здатність здійснювати кількісні вимірювання фізико-хімічних величин, описувати, аналізувати і критично оцінювати експериментальні дані.

ФК14. Здатність розуміти взаємозв'язок «Хімічна речовина» - «Біологічна роль».

ФК15. Здатність прогнозувати появу біологічної активності хімічної сполуки

ФК18. Здатність прогнозувати можливості застосування речовин/методів/підходів/рішень у сучасних нанотехнологіях.

ФК19. Здатність провести ідентифікацію будови нових синтезованих нанорозмірних матеріалів.

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: 1.1. як користуватися бібліографічними та реферативними базами даних	<i>Лекції</i>	<i>Контрольні роботи</i>	20%
2.	Вміти: 2.1. шукати дані та аналізувати їх.	<i>Практичні заняття</i>	<i>Контрольні роботи</i>	30%
	2.2. планувати літературний огляд	<i>Практичні заняття</i>	<i>Контрольні роботи</i>	30%
3.	Комунікація: 3.1. Працювати в групі на семінарах та практичних роботах.	<i>Практичні заняття</i>	<i>Звіти</i>	10%
4.	Автономність та Відповідальність: 4.1. Самостійно працювати з науковою та навчально-методичною літературою, здійснювати пошук та узагальнення науково-технічної інформації.	<i>Самостійна робота</i>	<i>Контрольна робота</i>	10%

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Результати навчання дисципліни	Програмні результати навчання			
	1	2	3	4
ПРН24. Використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації даних.	+	+	+	
ПРН26. Розуміти зміну/появу біологічної функції при перебігу біохімічних перетворень.		+	+	+
ПРН27. Прогнозувати появу біологічної активності хімічної сполуки.		+	+	+
ПРН29. Розуміти взаємозв'язок хімічних та фізичних властивостей речовин.			+	+
ПРН30. Прогнозувати застосування речовин/методів/ підходів/рішень у сучасних нанотехнологіях.		+	+	

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. Атрибути наукової публікації. Історичні відомості про формат збору інформації та розвиток систем каталогізації наукового знання. Основні поняття наукометрії. Індекси цитувань. Імпакт фактор та індекс Гірша.	2		
	Практичне заняття 1. Ідентифікатор цифрового об'єкта (DOI). ISBN - Міжнародний стандартний книжковий номер. Оператори пошуку. Символи усічення. Пошук словосполучень та по імені автора. Показники (індекси) цитування та глибина архіву даних: Science Citation Index Expanded, Social Sciences Citation Index, Arts & Humanities Citation Index, Emerging Sources Citation Index, Conference Proceedings Citation Index, Book Citation Index, Index Chemicus і Current Chemical Reactions.		6	
	Самостійна робота 1. Аналіз публікацій наукової групи де працює (планує працювати) студент.			10
2	Тема 2. Scopus та Web of Science Бази даних Scopus та Web of Science, їх структура, способи наповнення, схожість та відмінності. Пошук наукової інформації з використанням цих баз.	2		

	Практичне заняття 2. Пошук публікацій щодо заданої тематики з використанням Scopus та Web of Science		6	
	Самостійна робота 2. Пошук відповідної наукової літератури, що стосується кваліфікаційної роботи студента.			10
3	Тема 3. Реферативні бази даних що дозволяють структурний пошук. Reaxys, SciFinder. Бази даних Reaxys та SciFinder, їх структура, способи наповнення, схожість та відмінності. Методологія пошуку наукової інформації з використанням цих баз.	2		
	Практичне заняття 3. Пошук публікацій щодо заданої тематики з використанням Reaxys та SciFinder за структурним та підструктурним запитом.		6	
	Самостійна робота 3. Пошук та аналіз наукової літератури, що стосується кваліфікаційної роботи студента.			10
4	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.	2		
	Практичне заняття 4. Пошук біологічної активності об'єктів з якими працює (планує працювати) студент.		6	
	Самостійна робота 4. Пошук потенційної біологічної активності речовин, що стосується кваліфікаційної роботи студента.			10
5	Тема 5. Розширений пошук наукової інформації. Методологія пошуку інформації з використанням декількох баз даних. Релевантність пошуку.	2		
	Практичне заняття 5. Знаходження найбільш вагомих публікацій, що стосується заданої тематики.		6	
	Самостійна робота 5. Пошук та аналіз літературних даних що стосується кваліфікаційної роботи студента. Підготовка переліку джерел для написання літературного огляду.			10

Загальний обсяг 90 год., в тому числі:

Лекції – 10 год.

Практичні – 30 год.

Самостійна робота - 50 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>

10. Додаткові джерела та інформація:

1. <https://www.reaxys.com>
2. <https://scifinder.cas.org>
3. <https://www.scopus.com>
4. <https://www.drugbank.ca>

Контрольні запитання до курсу:

1. Атрибути наукової публікації
2. Різниця між науковою публікацією та патентом
3. Різниця між науковою статтею та тезисом на конференції.
4. Різниця між різними типами наукових публікацій таких як research article, letter, note, account, review.
5. Наукометрична база Scopus, її можливості
6. Наукометрична база Web of Science, її можливості
7. Порівняння Scopus та Web of Science
8. Наукометричні показники
9. База даних Reaxys, її можливості
10. База даних Scifinder, її можливості.
11. Сформулювати запит субструктурного пошуку.
12. Запропонувати синтез сполуки використовуючи Reaxys та Scifinder.
13. Drugbank. Організація роботи з базою та її можливості.
14. Використання Reaxys Medicinal Chemistry для пошуку біологічної активності молекули.
15. Використання ChEMBL для пошуку біологічної активності молекули
16. Використання DrugBank для пошуку біологічної активності молекули