

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

**Хімічний факультет**  
Кафедра органічної хімії

**«ЗАТВЕРДЖУЮ»**

Заступник декана/директора  
з навчальної роботи  
Павленко В.О.



“8” 05 2019 року



**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

**СТАТИСТИЧНІ ТА КОМБІНАТОРНІ  
МЕТОДИ В ХІМІЇ**

для студентів

галузі знань **10 Природничі науки**  
спеціальність **102 Хімія**  
освітній рівень **“магістр”**  
освітня програма **Хімія**  
вид дисципліни **обов'язкова**

Форма навчання **денна**  
Навчальний рік **2019/2020**  
Семестр **I**

(I семестр програми підготовки за ОР «магістр»)

Кількість кредитів ECTS **4 кредити**

Мова викладання, навчання та оцінювання **українська**

Форма заключного контролю **залік**

Викладач (лектор): **Гайдай Сніжана Вікторівна**  
**Григоренко Олександр Олегович**

Пролонговано: на **2020/2021** н.р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

на **2021/2022** н.р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

**КИЇВ – 2019**

Розробники: **Гайдай Сніжана Вікторівна, к.х.н., доц.**



**Григоренко Олександр Олегович, к.х.н., доц.**

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри фізичної хімії



\_\_\_\_\_ (Фрицький І.О.)

Протокол № 7 від "9" квітня 2019 року

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри органічної хімії



\_\_\_\_\_ (Хиля В.П.)

Протокол № 15 від "14" 03 2019 року

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 4 від "08" 05 2019 року

Голова науково-методичної комісії \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_ Роїк О.С.)

"8" 05 2019 року

Протокол № від " " 2020 року

Голова науково-методичної комісії \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_ Роїк О.С.)

Протокол № від " " 2021 року

Голова науково-методичної комісії \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_ Роїк О.С.)

**1. Мета дисципліни** – ознайомлення студентів із елементами математичної статистики і критеріями, які використовуються для опису експериментальних даних; ознайомлення студентів із сучасними методологіями пошуку лікарських засобів, що базуються на використанні комбінаторного синтезу.

**2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:**

1. Знати загальну хімію на рівні бакалавра за спеціальністю «Хімія».
2. Знати математику на рівні бакалавра за спеціальністю «Хімія».
3. Знати основи статистичного аналізу на рівні бакалавра за спеціальністю «Хімія».
4. Знати органічну хімію на рівні бакалавра за спеціальністю «Хімія».

**3. Анотація навчальної дисципліни.** В рамках курсу «Статистичні та комбінаторні методи в хімії» магістри вивчають різноманітність критеріїв (параметричних і непараметричних), які дозволяють інтерпретувати, описувати, співставляти і порівнювати експериментальні дані;

джерела речовин з корисною біологічною активністю (хіти): комбінаторний синтез, синтез змодельованих хітів; біологічні мішені, пошук та оптимізація хітів, клінічні дослідження, залежність структура-активність (QSAR); дизайн ліків, докінг, твердофазний комбінаторний синтез, методи комбінаторної хімії, скринінг.

**4. Завдання:** розвиток теоретичних уявлень про сучасний стан і можливості статистичних методів і практичних навичок використання елементів математичної статистики для опису експериментальних даних; ознайомлення студентів технікою використання комбінаторного синтезу для потреб медичної хімії та із сучасними методологіями пошуку лікарських засобів;

**5. Результати навчання за дисципліною:**

Код	Результат навчання	Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання	Методи оцінювання поточний контроль (активність під час практичних ПтК-1 і поточних контрольних робіт ПтК-2 та контроль самостійної роботи ПтК-3), підсумковий контроль ПсК	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
<b>1. Знання</b>				
1.1	Знати місце курсу «Статистичні та комбінаторні методи в хімії» в системі сучасної хімічної науки	лекції, практичні, самостійні	ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5

1.2	Знати можливості та межі застосування статистичних методів та комбінаторного синтезу в хімії	лекції, практичні, самостійні	ПтК-2, ПтК-3, ПсК	10
1.3	Знати техніку використання статистичних методів та комбінаторного синтезу для реалізації практичних цілей в сучасній хімії	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	25
<b>2. Вміння</b>				
2.1	Вміти знайти правильний метод статистичної обробки хімічних експериментів	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	10
2.2	Вміти спланувати комбінаторну бібліотеку для високорезультативного пошуку	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	15
2.3	Вміти застосовувати обрані статистичні методи для обробки заданих даних; вміти здійснювати комбінаторний синтез	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	15
<b>3. Комунікація</b>				
3.1	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації даних, отриманих в ході статистичної обробки інформації та комбінаторного синтезу	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	5
<b>4. Автономність та відповідальність</b>				
4.1	Вміти самостійно фіксувати, інтерпретувати та відтворити результати експерименту	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	5
4.2	Дотримуватися правил техніки безпеки при роботі в хімічній лабораторії	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	5

**6. Співвідношення результатів навчання дисципліни (РНД) із програмними результатами навчання (ПРН):**

ПРН	РНД (код)											
	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2		
<b>Знання та вміння</b> Знати сталі наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.	+	+		+								
Знати та розуміти основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються предметної області, опанованої у ході магістерської програми.	+			+								
Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення якісних та кількісних задач незнайомої природи.	+	+	+	+		+						
Знати методи синтезу та аналізу хімічних сполук.		+	+	+	+	+						
Знати методи комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.	+	+	+	+								
Знати методологію та організації наукового дослідження.	+	+	+	+								
Знати іноземну мову на рівні B2							+	+		+		
Вміти ясно і однозначно донести результати власного дослідження до фахової аудиторії та/або нефаківців.							+	+	+	+	+	
Знати методологію процесів навчання й виховання, а також передові методи формування навичок організації самостійної роботи								+	+	+	+	
Здійснювати систематизацію та критичний аналіз даних.	+			+	+	+	+	+				
Планувати, організовувати та здійснювати експериментальну роботу самостійно та автономно.							+	+	+	+	+	
Проводити лабораторні процедури з використанням сучасних контрольно-вимірювальних приладів.		+	+	+	+	+	+	+				
Виконувати обробку результатів досліджень з використанням спеціального програмного забезпечення.				+			+	+	+	+		
Обирати адекватні поставленій задачі методи комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.			+		+	+	+	+	+	+		
Використовувати інформаційно-комунікаційні технології для вирішення загальних професійних задач.					+	+	+	+				
Представляти науковий та практичний матеріал в письмовій та усній формах.	+						+	+	+	+	+	
Представляти результати досліджень англійською мовою	+						+	+	+	+	+	

ПРН	РНД (код)										
	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2	
Перекладати фахову літературу та розуміти наукові тексти хоча б однією іноземною мовою	+			+		+	+	+	+	+	
Працювати самостійно або в групі, отримати результат у межах обмеженого часу з наголосом на професійну сумлінність та наукову доброчесність	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	
Складати технічне завдання до проекту, розподіляти час, організовувати свою роботу, складати звіт.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	
Здійснювати моніторинг та аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури.	+	+	+	+	+	+	+	+			
Використовувати набуті знання та компетенції з хімії для вирішення прикладних задач.				+			+	+			
Аналізувати наукові проблеми та пропонувати їх вирішення на абстрактному рівні шляхом декомпозиції їх на складові, які можна дослідити окремо.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	
Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	
<b>Комунікація</b> Володіти навичками публічної мови та ведення дискусії з колегами та цільовою аудиторією..				+		+	+	+	+	+	
Працювати в міждисциплінарній команді, мати навички міжособистісної взаємодії з урахуванням етичних норм.				+	+	+	+	+	+	+	
Використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології для спілкування, обміну та інтерпретації даних.				+		+	+	+	+	+	
<b>Автономія та відповідальність</b> Оцінювати ризики у професійній діяльності та здійснювати запобіжні дії.	+								+	+	
Брати на себе відповідальність за виконання експериментів.	+								+	+	
Діяти соціально та громадянсько свідомо на основі етичних міркувань.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	
Уміти вчитись самостійно для безперервного професійного розвитку.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	
Приймати обґрунтовані рішення, нести відповідальність за власні судження та результати.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	

## 7. Схема формування оцінки

### 7.1. Форми оцінювання студентів:

#### - семестрове оцінювання

- 1.1. усна відповідь (колоквіум) під час практичного заняття;
- 1.2. активність під час практичних занять;

1.3. виконання домашньої самостійної роботи;

1.4. написання модульної та підсумкової контрольної роботи.

**- підсумкове оцінювання**

залік.

**7.2. Організація оцінювання** (за формами контролю згідно з графіком навчального процесу):

	Змістовий модуль 1		Змістовий модуль 2		Підсумкова контрольна робота	
	Min. – 24 бали	Max. – 40 балів	Min. – 24 бали	Max. – 40 балів	Min – 12 бали	Max – 20 балів
Усна відповідь	6	10	6	10		
Практична робота	12	20	12	20		
Виконання домашньої самостійної роботи	3	5	3	5		
Модульна контрольна робота 1	3	5				
Модульна контрольна робота 2			3	5		
Підсумкова контрольна робота					12	20

*Залікова оцінка може бути зарахована студенту, який виконав усі обов'язкові види робіт, які передбачаються навчальним планом з дисципліни "Статистичні та комбінаторні методи в хімії" (а саме: виконання зазначених у програмі домашніх самостійних робіт, написання контрольних робіт, виконання практичних робіт, усні доповіді на заняттях), і при цьому за результатами модульно-рейтингового контролю в семестрі набрав впродовж семестру сумарно кількість балів, не меншу ніж критично-розрахунковий мінімум (60 балів).*

Для студентів, які набрали впродовж семестру сумарно меншу кількість балів ніж критично-розрахунковий мінімум для заліку допускається написання реферату за темами доповіді чи самостійної роботи, за які отримана незадовільна оцінка, або перескладання колоквиуму чи МКР, за які отримана незадовільна оцінка, з дозволу деканату (за наявності поважної причини, що не дозволила вчасно та якісно підготуватися до доповіді / колоквиуму / МКР).

У випадку відсутності студента з поважних причин відпрацювання та перездачі МКР здійснюються у відповідності до „Положення про порядок оцінювання знань студентів при кредитно-модульній системі організації навчального процесу” від 1 жовтня 2010 року.

### 7.3. Шкала відповідності оцінок

За 100 – бальною шкалою	За національною шкалою
90 – 100	зараховано / passed
85 – 89	
75 – 84	
65 – 74	
60 – 64	
1 – 59	не зараховано / fail

## 8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій і лабораторних занять

№ теми	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	практичні	С/Р
<b>Змістовий модуль 1. Статистичні методи в хімії</b>				
1	Елементи математичної статистики. Основні поняття і визначення. Статистичний розподіл.	1	1	5
2	Густина і функція статистичного розподілу. Чисельні характеристики статистичного розподілу вибірки.	1	2	5
3	Інтервальні оцінки параметрів розподілу. Розподіл $\chi^2$ - «хі-квадрат», розподіл Стюдента, розподіл Фішера-Снедекорда.	1	1	5
4	Інтервальне оцінювання математичного сподівання, дисперсії і середньо-квадратичного відхилення нормально розподіленої величини.	1	2	5
5	Означення статистичної гіпотези. Статистична перевірка статистичних гіпотез.	1	2	5
6	Критерій статистичної перевірки гіпотез. Критерій узгодження Пірсона. Критерій узгодження Колмогорова.	1	2	6
7	Перевірка гіпотези про рівність математичних сподівань двох нормально розподілених випадкових величин. Перевірка гіпотези про рівність двох незалежних випадкових величин.	1	2	6
8	Модульна контрольна робота 1	1		6
<b>Змістовий модуль 2. Комбінаторні методи в хімії</b>				
9	Вступна лекція з комбінаторної хімії. Паралельний синтез. Використання комбінаторних методів.	1	2	5
10	Синтетичні підходи в комбінаторній хімії.	1	1	5
11	Мікрохвильове випромінення в комбінаторній хімії.	1	2	5



12	Дизайн комбінаторних бібліотек хімічних сполук.	1	1	5
13	Мішені лікарських засобів. Сучасні стратегії пошуку біологічно активних речовин.	1	2	5
14	Знаходження та оптимізація ліду. Ліганд-орієнтований та структурно-орієнтований дизайн лікарських засобів	1	2	6
15	Приклади розробки сучасних лікарських засобів. Модульна контрольна робота 2	1	2	6
	<i>Підсумкова контрольна робота</i>		1	
	<b>ВСЬОГО</b>	<b>15</b>	<b>25</b>	<b>80</b>

Загальний обсяг **120 год.**, у тому числі:

Лекцій – **15 год.**

Практичних – **25 год.**

Самостійна робота - **80 год.**

## Рекомендована література

### *Статистичні методи в хімії*

#### Основна:

1. Іщенко О.В., Михальчук В.М., Біла Н.І., Гайдай С.В., Білий О.В. Статистичні методи в хімії.—Донецьк: ДонНУ. – 2012. – 505 с.
2. Бобик О. І., Берегова Г. І., Копитко Б. І. Теорія ймовірностей і математична статистика. — К. : ВД «Професіонал», 2007. — 560с.
3. Анісімов В. В., Черняк О. І Математична статистика. — К. : Леся, 1995. — 104с.
4. Іщенко О.В., Яцимирський В.К., Гайдай С.В. Статистичні методи. – К.: LAT&K. – 2009. – 319 с.

#### Додаткова:

1. Бабак В. П., Марченко Б. Г., Фриз М. Є. Теорія ймовірностей, випадкові процеси та математична статистика. — К. : Техніка, 2004. — 288с.
2. Білушак Г. І., Бобик І. О., Ватаманюк О. З., Вовк М. І., Дрогомирецька Х. Т. Теорія ймовірностей і математична статистика. — Л. : Видавництво Національного ун-ту "Львівська політехніка", 2003. — 244с.
3. Бочаров П. П., Печинкин А. В. Математическая статистика. — М. : Изд. Рос. ун-та Дружбы народов, 1994. — 164с.
4. Воскобойников Ю. Е., Тимошенко Е. И. Математическая статистика. — Новосибирск : НГАСУ, 2000. — 116с

### *Комбінаторні методи в хімії*

#### Основна:

- [1] G. L. Patrick. Medicinal Chemistry. Oxford University Press, N.-Y., 2005.
- [2] Practice of Medicinal Chemistry (2nd Edition) Editor: Wermuth, C G. Elsevier, London, 2003.
- [3] K. C. Nicolaou, R. Hanks, W. Hartwig, Handbook of Combinatorial Chemistry, Wiley-VCH Verlag GmbH, 2002.
- [4] W. Bannwarth, B. Hinzen, Combinatorial Chemistry (Second Revised Edition), Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2006.

#### Додаткова:

- [7] H.P. Rang, M.M.Dale, J.M.Ritter, R.J.Flower. Pharmacology. Elsevier, 2007.
- [8] M.B.Smith. Organic Synthesis. N.-Y., 1994.
- [9] Journal of combinatorial Chemistry, ACS Publications. 1999-2010
- [10] Molecular Diversity, Springer, 2005-2010.

#### **Інтернет ресурси**