

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА  
ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ  
Кафедра фізичної хімії**

**«ЗАТВЕРДЖУЮ»**

Заступник декана  
з навчальної роботи



\_\_\_\_\_ Наталія УСЕНКО

« 06 » 2022 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ  
СТАТИСТИЧНІ ТА КОМБІНАТОРНІ  
МЕТОДИ В ХІМІЇ**

для здобувачів освіти

галузь знань	<b>10 Природничі науки</b>
спеціальність	<b>102 Хімія</b>
освітній рівень	<b>магістр</b>
освітня програма	<b>Хімія</b>
вид дисципліни	<b>обов'язкова</b>

Форма навчання	<b>денна</b>
Навчальний рік	<b>2022/2023</b>
Семестр	<b>1</b>
Кількість кредитів ECTS	<b>4</b>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<b>українська</b>
Форма заключного контролю	<b>залік</b>

Викладачі: доцент кафедри фізичної хімії Гайдай Сніжана Вікторівна

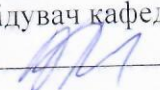

Професор кафедри органічної хімії Григоренко Олександр Олегович

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

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


**КИЇВ – 2022**

Розробники: Гайдай Сніжана Вікторівна к.х.н., доцент кафедри фізичної хімії ;  
Григоренко Олександр Олегович, д.х.н., професор кафедри органічної хімії

ЗАТВЕРДЖЕНО Завідувач кафедри органічної хімії  Володимир ХИЛЯ Протокол № від « » травня 2022 р.	ЗАТВЕРДЖЕНО Завідувач кафедри фізичної хімії  Ігор ФРИЦЬКИЙ Протокол № 6 від « 02 » травня 2022 р.
--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол від « 29 » червня 2022 року № 7

Голова науково-методичної комісії  Олександр ПОЇК

« 29 » червня 2022 року

**1. Мета дисципліни** – ознайомлення студентів з 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 або вибору 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, зіставляти і порівнювати експериментальні дані; а також вивчають джерела речовин з корисною біологічною активністю (хіпи): комбінаторний синтез, синтез змодельованих хігів; біологічні мішені, пошук та оптимізація хігів, клінічні дослідження, залежність структура-активність (QSAR); дизайн ліків, докінг, твердофазний комбінаторний синтез, методи комбінаторної хімії, скринінг.

**4. Завдання (навчальні цілі):** дисципліна спрямована на формування: здатності застосовувати знання у практичних ситуаціях (ЗК4); здатності оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт (ЗК8); здатності використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні із відповідними математичними інструментами для опису природних явищ (ФК1); здатності інтерпретувати, об'єктивно оцінювати і презентувати результати свого дослідження (ФК4); здатності застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства (ФК5); здатності 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 (ФК8).

**5. Результати навчання за дисципліною:**

Код	Результати навчання (1 – знати; 2 – вміти; 3 – комунікація; 4 – автономність та відповідальність)	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1.1	Знати місце курсу «Статистичні та комбінаторні методи в хімії» в системі сучасної хімічної науки	лекції, практичні, самостійні	усні опитування, перевірка завдань самостійної роботи	5
1.2	Знати можливості та межі застосування статистичних методів та комбінаторного синтезу в хімії	лекції, практичні, самостійні	перевірка завдань самостійної роботи, контрольна робота (тестові питання, розв'язання задач),	10

1.3	Знати техніку використання статистичних методів та комбінаторного синтезу для реалізації практичних цілей в сучасній хімії	лекції, практичні, самостійні	перевірка завдань самостійної роботи, контрольна робота (тестові питання, розв'язання задач)	25
2.1	Уміти знайти правильний метод статистичної обробки хімічних експериментів	практичні, самостійні	усні опитування, перевірка завдань самостійної роботи	15
2.2	Уміти спланувати комбінаторну бібліотеку для високорезультативного пошуку	практичні, самостійні	усні опитування, перевірка завдань самостійної роботи	15
2.3	Уміти застосовувати обрані статистичні методи для обробки заданих даних; уміти здійснювати комбінаторний синтез	лекції, практичні, самостійні	перевірка завдань самостійної роботи, контрольна робота (тестові питання, розв'язання задач)	20
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	усні опитування, перевірка завдань самостійної роботи	5
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями	практичні, самостійні	усні опитування, перевірка завдань самостійної роботи	5

## 6. Співвідношення результатів навчання дисципліни з програмними результатами навчання

Результати навчання дисципліни	Програмні результати навчання							
	1	1	1	2	2	2	3	3
Програмні результати навчання	1	2	3	1	2	3	1	2
P1. Знати та розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.	+	+	+					
P3. Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення нових якісних та кількісних задач хімії.				+	+	+		
P8. Уміти 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, організовувати та здійснювати експериментальні дослідження в галузі хімії з використанням сучасного обладнання, грамотно обробляти їх результати та робити обґрунтовані висновки.				+	+	+		
P14. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.	+	+	+	+	+	+		

## 7. Схема формування оцінки

### 7.1. Форми оцінювання студентів

#### Семестрове оцінювання:

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом:

**100 балів/60 балів**, а саме:

1. Контрольна робота №1: РН 1.2, РН 1.3, РН 4.1 – 35/21 бал
2. Контрольна робота №2: РН 1.3, РН 2.3 – 35/21 бал
3. Виконання розрахункових самостійних задач: РН 1.1, РН 1.2, РН 1.3, РН 2.1, РН 2.2, РН 2.3, РН 3.1, РН 3.2, РН 4.1, РН 4.2 – 20/12 балів
4. Усні опитування: РН 1.1, РН 2.1, РН 2.2, РН 3.1, РН 3.2, РН 4.2 – 10/6 балів

#### Підсумкове оцінювання (у формі заліку):

Семестровий контроль включає контрольні роботи, усні опитування і виконання розрахункових самостійних робіт. Оцінювання здійснюється за 100-бальною системою. Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом під час семестрове оцінювання **100 балів/60 балів**.

**Підсумкове оцінювання проводиться у формі заліку (письмової роботи, що включає весь матеріал курсу) для студентів, які протягом семестру набрали менше 60 балів.**

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом під час заліку: **20 балів /12 балів**.

Результати навчання які будуть оцінюватись: РН 1.1, РН 1.2, РН 1.3, РН 2.1, РН 2.2, РН 2.3. РН 3.1, РН 3.2

Форма проведення: письмова робота.

Види завдань: тестові питання (на 12 балів) і задачі (на 8 балів).

**Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни для студентів, яким потрібно писати залікову підсумкову роботу, оцінка за залік не може бути меншою, ніж 12 балів.**

**Студент допускається до заліку, якщо впродовж семестру він:**

набрав не менше, ніж **40 балів**;

виконав і здав розрахункові самостійні завдання

### 7.2. Організація оцінювання:

Контрольна робота №1: не раніше 7 тижня семестру;

контрольна робота №2: не раніше 10 тижня семестру;

персональні завдання для виконання розрахункової самостійної роботи студенти отримують не пізніше, як за 5 тижнів до закінчення семестру;  
оцінювання самостійної роботи: впродовж семестру.

Студенти мають право на одне перескладання контрольної роботи у визначений викладачем термін.

### 7.3. Шкала відповідності оцінок

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

## 8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій і практичних занять

№ теми	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	практичні заняття	сам. робота
<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
	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>УСЬОГО</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:

2. Іщенко О.В., Михальчук В.М., Біла Н.І., Гайдай С.В., Білий О.В. Статистичні методи в хімії.–Донецьк: ДонНУ. – 2012. – 505 с.
3. Бобик О. І., Берегова Г. І., Копитко Б. І. Теорія ймовірностей і математична статистика. — К. : ВД «Професіонал», 2007. — 560с.
4. Анісімов В. В., Черняк О. І Математична статистика. — К. : Леся, 1995. — 104с.
5. 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. Єріна А. М. Статистика: структурно-логічні схеми та задачі: навч. посіб. – Київ: КНЕУ, 2010. – 491 с.
4. Костюк В. О. Прикладна статистика: навч. посібник. Харків : ХНУМГ імені О. М. Бекетова, 2015. – 191с.
5. Тринько Р. І., Стадник М. Є. Основи теоретичної і прикладної статистики: навч. посіб. – Київ: Знання, 2011. – 397 с.

### *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:

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