

תאריך עדכון: 29/06/2021

שם ומספר הקורס:

מבוא לכימו-אינפורמטיקה 84846-01

שם המרצה: חנוך סנדרוביץ

סוג הקורס: (שיעור, תרגיל, סמינר, סדנה וכד')

שנת לימודים: תשפ"ב מסטר: א' היקף שעות: 2

אתר הקורס באינטרנט:

שעות הקורס: יום ה' 12:00-14:00

א. מטרת הקורס ותוצרי למידה (מטרות על / מטרות ספציפיות):
מטרת הקורס הינה להקנות לסטודנטים בסיס תיאורטי ויישומי בכימו-אינפורמטיקה תוך הדגשת האופנים בהם שיטות מתחום זה יוכלו לשמש אותם במחקריהם. בסיום הקורס הסטודנט:

- יוכלו להסביר מהי כימו-אינפורמטיקה
- ידעו מהן שיטות הכימו-אינפורמטיקה העיקריות ומהי התיאוריה העומדת בבסיסן
- יוכלו לקבוע אילו מבין שיטות הכימו-אינפורמטיקה מתאימה לפתרון בעיות שונות
- ידעו כיצד לקבל גישה לכלי כמו-אינפורמטיקה שונים
- יוכלו לקבוע האם מחקריהם יוכלו להיתרם משיטות כמו-אינפורמטיות
- יוכלו ליישם כלי כמו-אינפורמטיקה בסיסיים במחקרם

ב. תוכן הקורס: (רציונל, נושאים)

כימו-אינפורמטיקה מיישמת כלים מתחום מדעי המחשב, המתמטיקה, הסטטיסטיקה ותורת המידע כדי לפתור בעיות בכימיה ולעבד מידע כימי רחב היקף. שיטות כימו-אינפורמטיות הן בעלות שימושים רבים כמעט בכל תחומי הכימיה ובפרט בתכנון תרופות חומרים.

בקורס זה ילמדו הסטודנטים את יסודות הכימו-אינפורמטיקה על פי הנושאים המפורטים בתוכנית ההוראה. הידע שיצברו הסטודנטים במהלך הקורס יאפשר להם ליישם כלים כימו-אינפורמטיים בסיסיים במחקריהם הספציפיים.

מהלך השיעורים: הרצאות פרונטאליות מלוות בשקופיות וסרטונים.

תכנית הוראה מפורטת לכל השיעורים:

מס' השיעור	נושא השיעור	קריאה נדרשת	הערות
------------	-------------	-------------	-------

		Introduction to Chemo-informatics מבוא לכימו-אינפורמטיקה	1
	Textbook 2: Chapter 1	Representation and Manipulation of 2D Molecular Structures ייצוג מבנים בדר-מימד	2
	Textbook 2: Chapter 2	Representation and Manipulation of 3D Molecular Structures ייצוג מבנים בתלת-מימד	3
	Textbook 2: Chapter 3	Molecular Descriptors מאפיינים מולקולאריים	4
		Data Verification and Manipulation וידוי נתונים והצגתם	5
	Textbook 2: Chapter 5	Navigating Through Chemical Space: Similarity Analysis ניווט במרחב הכימי: ניתוח דמיון	6
	Textbook 2: Chapter 6	Navigating Through Chemical Space: Diversity Analysis ניווט במרחב הכימי: ניתוח מגוון	7
	Textbook 2: Chapter 4	Computational Models I מודלים חישוביים 1	8
	Textbook 2: Chapter 7	Computational Models II מודלים חישוביים 2	9
	Textbook 2: Chapter 9	Combinatorial Chemistry and Library Design ספריות קומבינטוריות ותכנון ספריות	10
		Selection of Screening Libraries בחירת ספריות לסריקה	11
		Material-Informatics	12
		Databases and Computer Software בסיסי נתונים ותוכנות	13

ג. דרישות קדם:

אין

ד. חובות / דרישות / מטלות:

בקורס זה יש חובת נוכחות בכל השיעורים, שתיבדק מדי שיעור. תלמיד שייעדר מעל שתי הרצאות ללא סיבה מוצדקת לא יורשה להגיש את עבודת הסיום, ולא יקבל ציון בקורס.

ה. מרכיבי הציון הסופי (ציון מספרי):

ניתוח מאמר כימו-אינפורמטי על פי השלבים הבאים (100%):

1. בחירת מאמר
2. קריאה בקורתית של המאמר
3. סיכום המאמר (30%)
4. דיון על המאמר עם המרצה (70%)

ו. ביבליוגרפיה:

ההרצאות תהינה מבוססות על מצגות שתוכנן יילקח ממקורות שונים

ספרי הלימוד (textbooks) וספרי עזר נוספים:

ספרי עזר:

1. Chemoinformatics: A Textbook by Johann Gasteiger (editor) and Thomas Engel (Editor)

2. An Introduction to Chemoinformatics by Andrew R. Leach and V. J. Gillet
3. Chemoinformatics: Concepts, Methods, and Tools for Drug Discovery by Jürgen Bajorath

ז. שם הקורס באנגלית: Chemoinformatics