تطوير برنامج اعداد معلم الكيمياء بكليات التربية في ضوء المعلوماتية الكيميائية chemoinformatics

إعداد:د/ دعاء سعيد محمود إسماعيل*

المقدمة والاحساس بالمشكلة:

لم يتم توظيف التكنولوجيا في البحوث المتعلقة بالكيمياء إلا في السنوات الأخيرة حيث تسمح للكيميائيين بتوليف واختبار ألاف إن لم يكن مئات الألاف من الجزيئات الجديدة والبحث عن تطبيقات جديدة لها في حين أنه قبل وجود هذه التقنيات كان الكيميائي النموذجى typical chemistry يقوم بدراسة جزئ واحد أو جزيئين فقط في أسبوع. ومع ذلك فإن نظام إدارة المعلومات واسترجاعها لم يتطور بما فيه الكفايه مع هذه التقنيات للسماح بتجميع المعلومات المتولدة وتحليلها بطريقة موحدة وفعالة مما يجعل من استخدام قاعدة معارفنا our knowledge base أفضل استخدام. **(Brown, 2009: 8:1)**

ومع تطور علم الحاسب computer science والشبكات والبرمجيات تم الحصول على المزيد من التطبيقات في مجالات البحث العلمي والانتاج والخدمات. وظهر تعبير **في السيليكو in silico** وهو تعبير يستخدم ليعنى "أداء من خلال الكمبيوتر أو بواسطة محاكاة الكمبيوتر". "Performed on computer or via computer simulation" . وتُعد المعلوماتية الكيميائية واحدة من تقنيات السيليكو in silico technologies المستخدمة في البحوث المتعلقة بالكيمياء. **(Xu, Ling, Hu, Huang, Li& Yao, 2013:879)**

وقد أجريت عدة مؤتمرات** اهتمت بالمعلوماتية الكيميائية منها : المؤتمر الدولى للمعلوماتية الكيميائية الذي يعقد سنويا منذ عام ١٩٩٩ حتى الأن حيث تم انعقاد المؤتمر الدولى السابع عشر للمعلوماتية الكيميائية في ٢٦ – ٢٧ يناير ٢٠١٥ في جدة بالمملكة العربية السعودية، وانعقد المؤتمر الدولى التاسع عشر للمعلوماتية الكيميائية في ٢٤-٢٥ يوليو ٢٠١٧ قي لندن بالمملكة المتحدة UK، وانعقد المؤتمر الدولى العشرين للمعلوماتية الكيميائية فى ٣٠ – ٣١ يناير ٢٠١٨ في جدة بالمملكة العربية السعودية ويهدف المؤتمر الدولى للمعلوماتية الكيميائية إلى تبادل الخبرات ونتائج البحوث على جميع جوانب المعلوماتية الكيميائية ، كما يوفر منصة متعددة التخصصات لمناقشة التحديات العملية التى تواجهها والحلول المعتمدة في مجالات المعلوماتية الكيميائية. والمؤتمر الألمانى للمعلوماتية

* مدرس مناهج وطرق تدريس الكيمياء بقسم المناهج وطرق التدريس وتكنولوجيا التعليم – كلية التربية – جامعة بنها

** تمت الاشارة إلى مواقع ومراجع المؤتمرات بقائمة المراجع بنهاية البحث

الكيميائية الذي يعقد سنويا منذ عام ٢٠٠٥ حيث تم انعقاد المؤتمر الالماني الخامس للمعلوماتية الكيميائية فى ٨- ١٠ نوفمبر ٢٠٠٩ في مدينة جوسلار Goslar بالمانيا، وانعقد المؤتمر الالماني التاسع للمعلوماتية الكيميائية فى ١٠- ١٢ نوفمبر ٢٠١٣ فى مدينة فولدا Fulda بالمانيا ، وانعقد المؤتمر الالماني العاشر للمعلوماتية الكيميائية فى ١-٥ يونيو ٢٠١٤ فى مدينة نوردويكرهوت بهولندا Noordwijkerhout, Netherlands ، وانعقد المؤتمر الألمانى الحادى عشر للمعلوماتية الكيميائية فى ٨-١٠ نوفمبر ٢٠١٥ فى مدينة فولدا Fulda بالمانيا، وانعقد المؤتمر الألمانى الثاني عشر للمعلوماتية الكيميائية فى ٦-٨ نوفمبر ٢٠١٦ فى مدينة فولدا Fulda بالمانيا، وانعقد المؤتمر الألمانى الثالث عشر للمعلوماتية الكيميائية فى ٥-٧ نوفمبر ٢٠١٧ فى مدينة ماينز mainz بألمانيا ، وانعقد المؤتمر الألمانى الرابع عشر للمعلوماتية الكيميائية فى ١١-١٣ نوفمبر ٢٠١٨ فى مدينة ماينز mainz بألمانيا وتسلط المؤتمرات الألمانية للمعلوماتية الكيميائية الضوء على الدور الجديد للمعلوماتية الكيميائية فى عالم المعلومات الحديث. كما عقد مؤتمر شيفلد السابع المشترك للمعلوماتية الكيميائية the seventh Joint Sheffield conference on chemoinformatics المنعقد في ٤-٦يوليو ٢٠١٦ بجامعة شيفلد، المملكة المتحدة UK.

كما توجد عدة دوريات متخصصة في المعلوماتية الكيميائية* منها : دورية المعلومات الكيميائية والنمذجة Journal of chemical information and modeling , ودورية المعلوماتية الحيوية – الكيميائية Chem – Bio informatics Journal , ودورية المعلوماتية الكيميائية Journal of cheminformatics , والدورية العالمية للمعلوماتية الكيميائية والهندسة الكيميائية International Journal of Chemoinformatics and Chemical Engineering ، ودورية المعلوماتية الكيميائية Chemical informatics , ودورية المعلوماتية الحيوية & المعلوماتية الكيميائية Journal of Bioinformatics & Cheminformatics.

كما أدى ظهور المعلومات الكيميائية كتخصص فرعي متميز للكيمياء distinct sub-discipline of chemistry إلى تطوير برامج تعليمية عالية المستوى لتزويد الطلاب بالمهارات التي هي حاليا مطلوبة بشكل متزايد في الصناعة في بعض الجامعات منها جامعة الهند وجامعة شيفلد ومجلس بحوث العلوم الهندسية والفيزيائية the Engineering and Physical Sciences Research Council (EPSRC بالمملكة المتحدة UK. **(Schofield, 2001: 932)**

* تمت الاشارة إلى مواقع الدوريات العلمية المتخصصة في المعلوماتية الكيميائية

ورغم أهمية المعلوماتية الكيميائية إلا إنه يوجد قصور في تناول موضوعاتها وتطبيقاتها في برامج إعداد معلم الكيمياء في كليات التربية* ومنها برامج إعداد معلم الكيمياء في كلية التربية جامعة بنها وجامعة عين شمس وجامعة دمنهور.

مشكلة البحث:

تتمثل مشكلة البحث في وجود قصور في برامج إعداد معلم الكيمياء من حيث تناولها لموضوعات المعلوماتية الكيميائية وتطبيقاتها وأدواتها بالرغم من كونها أحد فروع الكيمياء الحديثة.

وللتصدى لهذه المشكلة يحاول البحث الإجابة عن التساؤلات الأتية:

١. ما مجالات المعلوماتية الكيميائية وتطبيقاتها التي ينبغي تضمينها فى برامج إعداد معلم الكيمياء بكليات التربية ؟
٢. ما المعايير التي ينبغي توافرها في مقررات الكيمياء بكليات التربية في ضوء المعلوماتية الكيميائية وتطبيقاتها؟
٣. ما التصور المقترح لتطوير برنامج اعداد معلم الكيمياء بكليات التربية في ضوء المعلوماتية الكيميائية وتطبيقاتها؟
٤. ما فاعلية وحدة من التصور المقترح لتطوير برامج إعداد معلم الكيمياء في كليات التربية في تحصيل الجانب المعرفي للمعلوماتية الكيميائية؟

أهداف البحث:

سعى البحث الحالي إلى تحقيق الأهداف **التالية:**

- تحديد مجالات المعلوماتية الكيميائية وتطبيقاتها التي يمكن تضمينها في برامج إعداد معلم الكيمياء.
- إعداد التصور المقترح لتضمين المعلوماتية الكيميائية في برامج إعداد معلم الكيمياء.
- قياس فاعلية التصور المقترح لتضمين المعلوماتية الكيميائية في برامج إعداد معلم الكيمياء في تحصيل الجانب المعرفي للمعلوماتية الكيميائية.

* قامت الباحثة بتفحص محتوى برامج إعداد معلم الكيمياء في تلك الكليات في ضوء تناولها لموضوعات المعلوماتية الكيميائية

أهمية البحث:

استمد البحث الحالي أهميته مما يمكن أن يسهم فيه في إفادة كل من:

- كليات التربية: وذلك بإمداد القائمين على تطوير برامج إعداد معلم الكيمياء فيها بالتصور المقترح لتضمين المعلوماتية الكيميائية في برامج إعداد معلم الكيمياء والاستفادة من الموضوعات المعروضة بالتصور المقترح في تعديل بعض مقررات الكيمياء في هذا الإطار. وكذلك القائمين بالتدريس من خلال إمدادهم بدليل محاضر بما احتواه من أهداف وأنشطة تعليمية واستراتيجيات تدريسية وأساليب التقويم مما قد يفيدهم في تطوير المقررات المقدمة برامج إعداد معلم الكيمياء
- الطلاب المعلمين في برامج إعداد معلم الكيمياء من خلال الاستفادة من موضوعات المعلوماتية الكيميائية المقدمة لهم والاستفادة من تطبيقاتها.
- الباحثين في مجال المناهج وطرق تدريس الكيمياء: حيث يساعد البحثين في التفكير في البحث بمجال المعلوماتية الكيميائية.

حدود البحث:

- اقتصر البحث الحالي على قياس فاعلية التصور المقترح على الجانب المعرفي المتضمن في وحدة المعلوماتية الكيميائية وميكانيكا الكم والتي تم بناؤها تفصيلياً من التصور المقترح.
- تطبيق وحدة المعلوماتية الكيميائية وميكانيكا الكم على مجموعة من طلاب الفرقة الثالثة شعبة الكيمياء بكلية التربية جامعة بنها وتم اختيار الفرقة الثالثة حتى يكون الطلاب درسوا المتطلبات الرئيسة من مقررات الكيمياءالمتطلبة لموضوعات المعلوماتية الكيميائية المقدمة بالوحدة.

منهج البحث:

اعتمد البحث الحالي على استخدام المنهج الوصفي لتقويم مقررات الكيمياء المقدمة ببرنامج إعداد معلم الكيمياء. وكذلك المنهج شبه التجريبي لقياس فاعلية التصور المقترح المقدم. واستخدم البحث التصميم التجريبي للمجموعة الواحدة.

فرض البحث:

- لايوجد فرق دال إحصائياً عند مستوى ($\alpha \leq 0.01$) بين متوسطي درجات الطلاب في التطبيقين القبلي والبعدي لاختبار الجانب المعرفي للمعلوماتية الكيميائية

أداة البحث:

- اختبار الجانب المعرفي للمعلوماتية الكيميائية.

مصطلحات البحث:

المعلوماتية الكيميائية:

تطبيق طرق المعلوماتية لحل المشكلات الكيميائية المعنية بالتصميم الجزيئي molecular design، وتصميم التوليف (نظم تخليق المركبات) Synthesis design، والتحديد الهيكلي (التركيبى) structural identification. **(Xu, Ling, Hu, Huang, Li& Yao, 2013:879)**

المفاهيم النظرية للبحث:

ماهية المعلوماتية الكيميائية

على الرغم من أن أجهزة الكمبيوتر تساعد الكيميائيين منذ سنوات، لم يظهر مصطلح المعلوماتية الكيميائية إلا في الوقت القريب. ففي الأونة الأخيرة فقط بدأ الاعتراف بالمعلوماتية الكيميائية باعتبارها سبيلا – بما يتوافر بها من تطبيقات- لحل مشكلات كيميائية. **(Polanski, 2009:460) (Willett, 2011: 46)**

وقد تم الاعتراف بالمعلوماتية الكيميائية كمجال متميز في دراسة تطبيقات الحاسب على علوم الجزيئات الحاسوبية Computational molecular science منذ أواخر التسعينات حيث استخدم مصطلح المعلوماتية الكيميائية لأول مرة من قبل براون Brown في عام ١٩٩٨ ومع ذلك تم وصف المكونات الأساسية لأنظمة المعلوماتية الكيمائية الحديثة منذ عدة عقود. **(Bunin, Bajorath , Siesel & Morals, 2007:1) (Willett, 2011 : 46 ,52)**

وهناك جدل حول مصطلح المعلوماتية الكيميائية فقد يشار إلى مصطلح المعلوماتية الكيميائية Chemoinformatics و cheminformatics ، و تسمى ايضا chemical informatics، و Chemical information و chemi-informatics، و المعلوماتية الجزيئية molecular informatics، وعلم المعلومات الكيميائية chemical information science . **(Brown,2009: 8:6) (Willett,2011: 46) (Begam& Kumar, 2012: 1264) (Xu, Ling, Hu, Huang, Li& Yao, 2013:879)**

إلا أن مصطلح المعلوماتية الكيميائية Chemoinformatics هو الاسم الذي يتم استخدامه بشكل متزايد ليعبر عن الطرق الحاسوبية the computational methods التى تستخدم لدعم اكتشاف الجزيئات الكيميائية النشطة والفريدة بيولوجيا وأبرزها المستحضرات الصيدلانية والمواد الكيميائية الزراعية. **(Bishop, Gillet, Holliday & Willett, 2003: 250) .** وتُعد

المعلوماتية الكيميائية مصطلح تمت صياغته حديثا لوصف مجال يُنظم ويُنسق تطبيق الحواسيب في الكيمياء. **(Polanski, 2009 :460).** ويُعرف **براون Brown** المعلوماتية الكيميائية بأنها خليط من مصادر المعلومات لتحويل البيانات إلى معلومات ، والمعلومات إلى معارف. والغاية المقصودة منها هى اتخاذ قرارات أفضل بشكل أسرع في مجال تحسين وتحديد إدارة الأدوية. **(Brown, 2009: 8:6) .**

وتمثل المعلوماتية الكيميائية مصطلحاً عاماً يشمل تصميم، وانشاء، وتنظيم، وإدارة واسترجاع، وتحليل ونشر dissemination ، وتصور واستخدام المعلومات الكيميائية. **(Parthasarathi, R.; Elango, M.; Padmanabban, J.; Subramanian, V.; Roy, D.; Sarkar, U. & Chattaraj, P., 2006, 111) (Begam& Kumar, 2012: 1265)** . وتقدم المعلوماتية الكيميائية طرق حاسوبية للتعلم من البيانات الكيميائية chemical data ونمذجة المهام modeling tasks التى يواجهها الكيميائي. **(Gasteiger, 2016: 1)**

وتتعلق المعلوماتية الكيميائية بتطبيق الأساليب الحاسوبية لمعالجة مشكلات الكيمياء، مع التركيز بشكل خاص على معالجة معلومات التركيبية الكيميائية Chemical structural information وهذا يشمل مهام مثل البحث في قواعد البيانات، ومقارنة التراكيب والتراكيب ذات الصلة بالنشاط . **(Wathen, 2018, 3)**

وتُعد المعلوماتية الكيميائية هى واجهة العلم الذي يهدف في المقام الأول إلى اكتشاف كيانات كيميائية أصيلة novel chemical entities من شأنها أن تؤدى في نهاية المطاف إلى تطوير علاجات جديدة للإحتياجات الطبية ومع أن هذه الأساليب نفسها يتم تطبيقها أيضا في مجالات أخرى بشكل اساسي على جزيئات جديدة . **(Brown, 2009: 8:1)**

والتركيز الرئيس للمعلوماتية الكيميائية Chemoinformatics هو تحليل ومحاكاة ونمذجة و معالجة المعلومات الحاسوبية حول التراكيب الكيميائية chemical structures وتمثيلها إما في شكل مخططات ثنائية الأبعاد (2D) أو في شكل إحداثيات ذرية ثلاثية الأبعاد (3D)، مع معالجات تشمل مدى واسع من البحث، والنمذجة ، والمداخل الاحصائية. **(Willett, 2011 : 46)**، **(Begam& Kumar, 2012: 1264)**

وتُعرف المعلوماتية الكيمائية بأنها تطبيق طرق المعلوماتية لحل المشكلات الكيميائية المعنية بالتصميم الجزيئي molecular design ، وتصميم التوليف (نظم تخليق المركبات) Synthesis design ، والتحديد الهيكلي (التركيبى) structural identification . **(Xu, Ling, Hu, Huang, Li& Yao, 2013:879)** . ويعرفها جاستيجر **Gasteiger** بأنها تطبيق طرق

المعلومات informatics methods لحل المشكلات الكيميائية وتقديم فهم أوسع لدراسة مشكلات الكيمياء. **(Gasteiger, 2016: 2) (Brown, 2009: 8:6).**

وتُعد المعلوماتية الكيميائية مجال ذي تخصص بيني an interdisciplinary يضم علوم الحاسب computer science، والرياضيات والكيمياء. **(Xu, Ling, Hu, Huang, Li& Yao, 2013:879)** كما إنها علم متداخل interface science لأنه يجمع بين الفيزياء والكيمياء وعلم الأحياء والرياضيات والكيمياء الحيوية والإحصاء والمعلوماتية **(Begam& Kumar, 2012: 1264)**

المعلوماتية الكيميائية وبعض المفاهيم المرتبطة.

المعلوماتية الكيميائية / الكيمياء الحاسوبية Computational chemistry :

تعتمد الكيمياء الحاسوبية على التعلم الاستنتاجي من خلال الاستفادة من نظرية إجراء التنبؤات. في حين تستخدم المعلومات الكيميائية التعلم الاستقرائي ، والتعلم من البيانات ، لإجراء تنبؤات حول الظواهر الكيميائية. **(Gasteiger, 2016, 2)**

المعلوماتية الكيميائية / علم القياس الكيميائي Chemometrics

يمثل علم القياس الكيميائي تطبيق الأساليب الرياضية أو الاحصائية على البيانات الكيميائية . قد عرف كل من ماسارت Massart والجمعية الدولية للقياسات الكيميائية The International Chemometrics Society (ICS) علم القياس الكيميائي بأنه المجال الكيميائي chemical discipline الذي يطبق الرياضيات والاحصاءات، والمنطق الشكلي formal logic لتصميم واختيار الإجراءات التجريبية والقياسية المثلي، ولتوفير الحد الأقصى من المعلومات الكيميائية ذات الصلة عن طريق تحليل البيانات الكيميائية. للحصول على المعرفة حول النظم الكيمائية. عموما لا يتطلب علم القياس الكيميائي معلومات حول التركيب الكيميائي chemical structure، وبالتالي يتداخل مع المعلوماتية الكيميائية فقط في مجال تطبيق طرق التعلم الألى machine learning methods. ويستخدم على نطاق واسع في تصميم التجربة experiment design ، الهندسة الكيميائية chemical engineering، والكيمياء التحليلية analytical chemistry ومعالجة مجالات الأطياف – treatment of spectra fields. **(Voigt, 2008, 1598) , (Bhalerao, verma, D'souza, Teli, & Didwana, 2013, 478).**

ولم يشر علم القياس الكيميائي لكل تطبيقات الحاسوب في مجال الكيمياء وبدلا من ذلك ركز على بعض تطبيقات الحاسوب في الكيمياء التحليلية. وبدأ علم

القياس الكيميائي للتعامل مع الأهداف الأقل تعقيدا من التي تستهدف من قبل المعلوماتية الكيميائية. **(Gasteiger & Polanski, 2017, 1999)**

المعلوماتية الكيميائية / المعلوماتية الحيوية Bioinformatics

على خلاف المعلوماتية الكيميائية التي تتعامل مع جزيئات الحجم الذري "chemical size" molecules ، تستخدم المعلوماتية الحيوية الأدوات الحسابية لدراسة بنية ووظيفة الجزئيات الحيوية (الجينات والبروتينات، والأحماض الأمينية). وفى حين تركيز المعلوماتية الحيوية على بيانات التسلسل sequence data، فإن المعلوماتية الكيميائية تركز على معلومات التركيب (البنية) للجزيئات الصغيرة وتفاعلاتها ونشاطها البيولوجي. وتمثل المعلوماتية الكيميائية مجال واسع في الغالب يتضمن نمذجة ثلاثية الأبعاد 3D modeling (مجال القوة force field وحسابات ميكانيكا الكم) ونمذجة احادية الابعاد 1D (محاذة تسلسلsequence alignment). في الاخير in the latter يتم تمثيل جزئ حيوي biomolecule كسلسلة من الرموز (الحروف) (وحدات بناء building blocks) ونادرا ما تستخدم الرسوم البيانية ونماذج ناقلات الحجم fixed size vector models المستخدمة في المعلوماتية الكيميائية في المعلوماتية الحيوية. وبهذا المعنى تعتبر المعلوماتية الكيميائية والمعلوماتية الحيوية مكملة complementary لبعضها وهناك العديد من الأمثلة على تداخل هذه المجالات. **(Vogt, Wassermann& ، (Brown, 2009, 8:2) (Bhalerao, verma, D'souza, Teli, & Bajorath,2010 ,60 -61) Didwana, 2013, 478)**

التطور التاريخي / الجذور العلمية للمعلوماتية الكيميائية :

منذ البداية، استمدت الكيمياء معظم معرفتها من الملاحظات ومن البيانات المكتسبة من خلال هذه الملاحظات. وفي وقت متأخر فقط، نضجت الكيمياء النظرية إلى نقطة، في بعض الحالات، يمكن أن تجعل التنبؤات دقيقة بما يكفي لتلبية المتطلبات الكيميائية. ومع ذلك، فإن العديد من الظواهر الكيميائية معقدة للغاية بحيث لا يمكن معالجتها من خلال المبادئ الأولى. وبالتالي، فإن اكتساب المعرفة الكيميائية لا يزال يعتمد إلى حد كبير على البيانات التجريبية؛ عملية تنطوي على التعلم الاستقرائي: تحويل البيانات إلى المعلومات عن طريق الجمع بين البيانات ذات الصلة ثم المعلومات في المعرفة عن طريق تحليل مجموعات البيانات بأكملها. وقد كان الاعتراف منذ ٥٠ عامًا أن هذه العملية للتعلم الاستقرائي يمكن أن تستفيد من استخدام تكنولوجيا الكمبيوتر. لقد تم تطوير برنامج يمكنه معالجة كميات كبيرة من البيانات أكثر مما يستطيع الباحث البشري القيام به، ويمكنه أن يفعل ذلك مرة أخرى بسرعة كبيرة أكثر مما يستطيع أحد العلماء تحقيقه. **(Gasteiger, 2016,1)**

ويعود مجال المعلوماتية الكيميائية إلى الستينيات 1960s على الرغم من أن اسم المعلوماتية الكيميائية تمت صياغته فقط في عام ١٩٩٨. وقد تم رسم وجهه نظر توضيحيه تاريخيه من خلال تطور الدوريات التى تنشر أبحاث التخصص حيث شكلت المعلومات مكونا مهماً للمعلوماتية الكيميائية وكان هذا أحد الأسباب التي دفعت دورية الوثائق الكيميائية the journal of chemical documentation إلى أن تغير اسمها إلى دورية المعلومات الكيميائية وعلوم الحاسب the journal of chemical information and computer sciences فى عام ١٩٧٥ . وبعد ذلك، تم تغيير الاسم إلى دورية المعلومات الكيميائية والنمذجة the journal of chemical information and modeling في عام ٢٠٠٥، بعد علم الحاسب computer science بعيدا جدا عن مجال الكيمياء . وبدأت مجلة المعلوماتية الكيميائية في الظهور في عام ٢٠٠٩. وعندما تم تقديم مصطلح المعلوماتية الكيميائية ، تم بالفعل صياغة مصطلح علم القياس الكيميائي chemometrics وكان هذا هو المجال الأول لتطبيقات الحاسوب في الكيمياء وقد شاع اسمه. وفي بداية علم الحاسوب computer science أدرك الكيميائيون قدرته الهامة على تخزين المعلومات الكيميائية، من أجل النمذجة الجزيئية molecular modeling ومن أجل التعامل مع معالجة التراكيب structure manipulation. في نفس الوقت كان احضار الجزيئات إلى عالم الكمبيوتر الافتراضي مشكلة كبيرة معقدة والتى لم تكن ابداً محاولة من قبل علم القياس الكيميائي. **(Gasteiger & Polanski, 2017, 1999)**

ويمكن استعراض الجذور العلمية للمعلوماتية الكيميائية التي وضعت الاساس لتطوير المعلوماتية الكيميائية chemoinformatics كنظام بحثي research discipline فيما يلي:

في ستينيات القرن العشرين 1960s، تم إجراء العديد من المحاولات المستقلة في مجالات كيميائية مختلفة لاستخدام قوة الحواسيب لنمذجة الظواهر الكيميائية وتوضيحها وبهدف تطوير أساليب لتخزين واسترجاع معلومات التركيب الكيميائي. وفى منتصف الستينيات، بدأ العمل على قواعد بيانات حول المعلومات الكيميائية databases on chemical information على مجال الكيمياء العضوية. وقد تناول مورجان Morgan عام ١٩٦٥ مشكلة التمثيل الفريد والواضح للتركيبات (الهياكل) الكيميائية والتى أدت إلى بناء قواعد بيانات خدمة المستخلصات الكيميائية The Chemical Abstract Service databases حيث تم تخزين التراكيب الكيميائية لاول مرة في صيغة قابلة للبحث عن طريق الخدمات الكيميائية المجردة Chemical Abstract Service. **(Bunin, (Gasteiger, 2016,1- 2) Bajorath , Siesel & Morals, 2007:4) ، (Gasteiger & Polanski, 2017, 1999)**

وبدأت الجهود لربط تراكيب المركب compound structures والأنشطة من الناحية الكمية من خلال نمذجة العلاقات الخطية مع المساعدة من الواصفات الجزيئية ، ومن ثم تم تطوير طرق لإنتاج علاقات التركيب / النشاط كمية (QSAR / QSPR) للتنبؤ بالبيانات الفيزيائية والكيميائية والبيولوجية والبيئية للمواد الكيميائية . حيث قام هانش وفوجيتا Hansch and fujita بنشر أعمالهم الاساسية في نمذجة النشاط البيولوجى كميا quantitatively modeling biological activity مما أدى إلى إنشاء مجال علاقات النشاط – التركيب الكمية the field of quantitative structure – activity relationship (QSAR) ، حيث وفرت هذه الدراسات أساساً للتحليل الكمى لعلاقات التركيب – النشاط quantitative structure – activity relationship (QSAR) analysis الذي امتد في نهاية المطاف إلى QSAR متعدد الأبعاد في عام ١٩٨٠. وأدى تطوير أساليب رياضية لتكوين مثل هذه العلاقات إلى إنشاء حقل علمي بالكامل هو القياس الكيميائي (chemometrics). **(Bunin, Bajorath, Siesel & Morals, 2007:4) ، (Gasteiger, 2016,1- 2) ، (Gasteiger & Polanski, 2017, 1999)**

وفي اواخر الستينيات تم إدراك أن أنابيب أشعة الكاثود توفر إمكانية لتصور نماذج جزيئية ثلاثية الأبعاد حيث صور لانغريدج وزملائه النماذج الجزيئية ثلاثية الأبعاد على أنابيب أشعة الكاثود وتم إجراء عدة اختبارات للتنبؤ بمعلومات التركيب الكيميائي من البيانات الطيفية وتم وضع مداخل اخرى لتوضيح التركيب (البنية) بمساعدة الكمبيوتر Computer – Assisted CASE Structure Elucidation (CASE) من قبل Sasaki في اليابان ومونك Munk في اريزونا. وبدأ مشروع DENDRAL فى عام ١٩٦٤ في جامعة ستانفورد لاستخلاص بنية المركبات العضوية من أطيافها الكلية mass spectra ويعتبر هذا العمل على نطاق منهجًا أساسيًا لتطبيق الذكاء الاصطناعي على المشكلات الكيميائية.

(Gasteiger & Polanski, 2017, 1999- 2000) (Gasteiger, 2016,1- 2)

ثم شرعت عدة مجموعات في هارفارد Harvard ، وبراندیز Brandeis ، و وستوني بروك وجامعة ميونيخ التقنية في المانيا في تطوير أنظمة لتصميم التركيبات العضوية (مشكلة تصميم التوليف بالمساعدة الحاسوبية the problem of computer – assisted synthesis design (CASD) .

(Gasteiger & Polanski, 2017, 2000) (Gasteiger, 2016, 2)

وخلال السبعينيات، تم تطوير طرق للتراكيب الفرعية (البنية التحتية) substructure ثنائية الأبعاد وثلاثية الأبعاد للبحث في الصيدلة الأمر الذي جعل من الممكن البحث في قواعد البيانات للعناصر والتراكيب المرغوبة أو الجزئيات النشطة. وفى الثمانينات ، تم تكثيف طرق التجميع clustering methods

للتطبيقات الكيميائية وأصبحت شائعة جدا لتصنيف مجموعات البيانات الجزيئية Molecular data sets ، وتم تطبيقها لاستكشاف أوجه التشابه من وجهات نظر مختلفة وأصبح مفهوم التشابه الجزيئي نفسه موضوع بحثي رئيسي في أواخر الثمانينيات. **(Bunin, Bajorath, Siesel & Morals, 2007:4)**

وقد وسع تحليل التشابه الجزيئي Molecular similarity analysis مداخل QSAR ، حيث تم دراسة تأثير تعديلات المركب الصغيرة small compound modification على النشاط . وهكذا فإن العلاقات بين التركيب الجزيئي molecular structure والخصائص والنشاط البيولوجى biological activity بدأت تستكشف من وجهات نظر أكثر عالمية. وفى خلال التسعينيات . استكملت مفاهيم التنوع والاختلاف الجزيئي Molecular diversity and dissimilarity وتحليل التشابه وتم تطوير خوارزميات لتصميم مكتبات المركبات المتنوعة كيميائياً chemically diverse compounds libraries واختيار (انتقاء) المركبات المختلفة أو المتباينة من قواعد البيانات selection of diverse compounds from databases **(Bunin, Bajorath , Siesel & Morals, 2007:4)**

على الرغم من أن اياً من الأنظمة التي تم تطويرها لم تجد قبولا عاما من قبل الكيميائيين العضويين ، إلا أن العمل على هذه الأنظمة طور في نهاية المطاف الأساس لقواعد البيانات الداخلية الخاصة بالتركيبات (الهياكل) الكيميائية والتفاعلات مثل قواعد البيانات MACCS, REACCS, and The Beilstein database. **(Gasteiger & Polanski, 2017, 2000)**

وكما يبدو أن كل هذه الدراسات لم تكن مترابطة ، فقد تم إدراك أكثر وأكثر أن التطورات المختلفة كان عليها أن تصارع مشاكل مماثلة ، لا سيما مع تمثيل ، معالجة واسترجاع معلومات التركيب الكيميائي. وعلاوة على ذلك ، فإن العديد من هذه الطرق لتطوير أساليب الكمبيوتر للتطبيقات الكيميائية كانت تستخدم نفس الأساليب الرياضية لتحليل البيانات الكيميائية أو لبناء نماذج كمية. ومع ذلك ، لم يكن حتى نهاية التسعينات من القرن الماضي الاسم الذي أُطلق على هذا الحقل: المعلوماتية الكيميائية chemoinformatics. حتى أصبح من الواضح أن المعلوماتية الكيميائية يمكن أن يكون لها تطبيقات في أي مجال من مجالات الكيمياء والعلوم ذات الصلة.: **(Gasteiger, 2016, 2)**

وعلى الرغم من أن العديد من الجهود الأخرى قد ساهمت –دون شك– إسهاما كبيراً في تشكيل المعلوماتية الكيميائية وساعدت على تشكيلها كما نفهمها اليوم، فمن الواضح أن موضوعين رئيسين هيمنا على تطوير هذا التخصص " المعلوماتية الكيميائية" : تنظيم البيانات الكيميائية chemical data organization and mining، بالاضافة إلى استكشاف

العلاقات بين التركيب والنشاط the exploration of structure – activity relationships (من وجهات نظر مختلفة عديدة). **(Bunin, Bajorath, Siesel & Morals, 2007:4)**

مجال المعلوماتية الكيميائية : The scope of chemoinformatics

يمكن تقديم المعلوماتية الكيميائية عن طريق المشكلات والمفاهيم الأساسية التي تم تطويرها في هذا التخصص:

جدول (١) : المعلوماتية الكيميائية من المشكلات إلى المفاهيم.

(Polanski & Gasteiger, 2017, 2001)

المشكلات	المفاهيم الأكثر أهمية
توثيق البيانات الكيميائية وعمليات البحث: البحث في قواعد البيانات وإدارتها	SMILES coding* ترميز SMILES
حساب الواصفات الجزيئية : الرسوم البيانية الكيميائية ثنائية الأبعاد وتمثيلات النمذجة الجزيئية ثلاثية الأبعاد و تحويلها (تخطيطها) إلى أرقام مفردة (0D)، ناقلات، بصمات أصابع (1D) ، مصفوفات، الخرائط السطحية (2D)، السطح surface والتمثيلات الذرية، ومجال القوة، وبيانات مستقبلات افتراضية أو حقيقية (ثلاثية الأبعاد).	Connectivity (graph theory approaches) مداخل الاتصال (نظرية الرسم البياني) A dditivity concept مفهوم الإضافة Molecular modeling النمذجة الجزيئية Force fields مجالات القوة
النمذجة الجزيئية: توليد بيانات التركيب (الهيكل) الجزئي (ثلاثي الأبعاد في السيلكو من تمثيلاتها أحادية الأبعاد وثنائية الأبعاد. يشمل ذلك كلا التدوين للتوبولوجيا الجزيئية والواصفات الجزيئية، بمعنى، البيانات التوضيحية الذرية (المحاكاة المحسوبة)	Molecular mechanics ميكانيكا الجزيئية Molecular dynamics الديناميكا الجزيئية Force fields مجالات القوة Molecular interaction field مجال التفاعل الجزيئي Partial atomic charges الشحنات الذرية الجزيئية Lipophilic potential الجهد المحب للدهون
توضيح التركيب (البنية) : يتم تعيين خاصية (علاقات الأطياف – التركيب) إلى البنية (التركيب) الجزئي في FCS عندما تحاول إيجاد بنية لها أطياف معينة أو في هيكل (إصدار ((FCS[1], VCS[2]) نحن نقوم بمحاكاة أطياف لجزئ مادة معينة.	RDF[3] Structure coding (2D) ترميز التركيب RDF ثنائي الأبعاد. 2D structure – 2D spectra correlation علاقة الطيف ثنائي الأبعاد – التركيب (البنية) ثنائية الأبعاد.
رسم خرائط التركيب (البنية) للنشاط SAR : هناك حاجة إلى مجموعة تركيبات (مواد Fcs) لدراسة SAR ، والتى عادة ما يتم توليفها. الهدف الحقيقي من SAR عو عادة التنبؤ بسلسلة التريب لتصميم الركيبات (الهياكل) والمواد الجديدة بواسطة تنبؤات الخاصية في إجراءات (كيفية) أو كمية.	SAR[4] QSAR[5] QSAR domain Similarity measures قياسات التشابه Privileged structures الهياكل المتميزة Fragonomics
التنبؤ بالخاصية : يتم تعيين ورسم خريطة سلسلة مركبات (FCS) من FCS إلى VCS حيث يتوفر إصداران أساسيان، بمعنى ، الخاصية مقابل الخاصية أو التركيب مقابل الخاصية. ومع ذلك ، فى خطوة التصميم للمركبات الجديدة في VCs (يمكننا تصميم كل من مركبات VCS أو FCS حيث يمكن تسجيل بعض الخصائص في قواعد البيانات أو الأدبيات) .	QSAR QPAR[6] Log P versus partition coefficient لوغاريتم P مقابل معامل التقسيم Fragonomics

* SMILES coding: Simplified Molecular – input Line Entery System coding.
[1] FCS: Factual Chemical substance (Factual Chemical Space)
[2] VCS: Virtual Chemical substance (Virtual Chemical Space)
[3] RDF: Redical Distribution Function
[4] SAR : structure – activity relationship
[5] QSAR: quantitative structure – activity relationship
[6] QSPR: quantitative Property – activity relationship

المشكلات	المفاهيم الأكثر أهمية
	Virtual screening الفحص الافتراضي
تصميم التوليف : تصميم التركيب (التوليف/ التخليق) العضوى في المنتج (الجزئ المستهدف) إلى مخطط وخريطة الكاشف (مكافئ الكاشف)	synthon Retrosynthetic analysis تحليل Synthesis tree شجرة التوليف

مجالات تطبيق المعلوماتية الكيميائية بفروع الكيمياء:

تم تطبيق المعلوماتية الكيميائية ليس فقط في بحوث الكيمياء ولكن أيضا في المجالات المتعلقة بالكيمياء، أى اكتشاف الأدوية، وتصميم المبيدات pesticide design ، وحماية البيئة Environment protection ، وتصميم المواد material design، والطب الصينى التقليدى Traditional Chinese Medicine ، وسلامة الغذاء safety Food وغيرها من المجالات التى تتعلق بالكيمياء. **(Xu, Ling, Hu, Huang, Li& Yao, 2013:879).** حيث أجريت نسبة كبيرة من بحوث المعلوماتية الكيميائية في عدد صغير نسبياً من المختبرات الأكاديمية العالمية. ومع ذلك وبسبب الطبيعة التطبيقية لمجال المعلوماتية الكيميائية تم إنجاز بحوث كبيرة أيضا في قطاعات الصناعة في شركات الكيمياويات بما في ذلك المستحضرات الصيدلانية pharmaceuticals والبتروكيمياويات Petrochemicals ، والمواد الكيميائية الدقيقة Fine chemicals ، وعلوم التغذية، والكيماويات الزراعية وهى مناطق متميزة حيث تلعب المعلوماتية الكيميائية دورا هاما في التاريخ الحديث للعلوم الجزيئية. **(Brown, 2009: 8:2) ، (Begam& Kumar, 2012: 1264-1265)** كما تم تطبيق المعلوماتية الكيميائية في المزيد من المجالات المرتبطة بالكيمياء في تطبيقات الحياة . **(Xu, Ling, Hu, Huang, Li& Yao, 2013:879)**

ومن الدراسات التى أجريت في مجال البحوث الكيميائية وتصميم المبيدات **دراسة(Xu, Ling, Hu, Huang, Li & Yao, 2013)** وقدمت الدراسة نماطاً حديثاً للبحث الكيميائي The modern mode of chemical research و تطوير النمط التقليدي Traditional mode إلى نمط جديد modern mode يربط بين التفكير والتجربة والسيليكو in silico . وهو تعبير يعني " يؤدى بواسطة الكمبيوتر أو عن طريق محاكاة الكمبيوتر" . حيث تُعد المعلوماتية الكيميائية واحدة من تقنيات السيليكو المستخدمة في بحوث الكيمياء. وقدمت الدراسة نظاماً للمعلوماتية الكيميائية لتصميم المبيدات chemoinformatics platform for pesticide design ودُعم هذا النظام بمجموعة من البرمجيات software وقواعد البيانات database وقواعد المعرفة knowledge base.

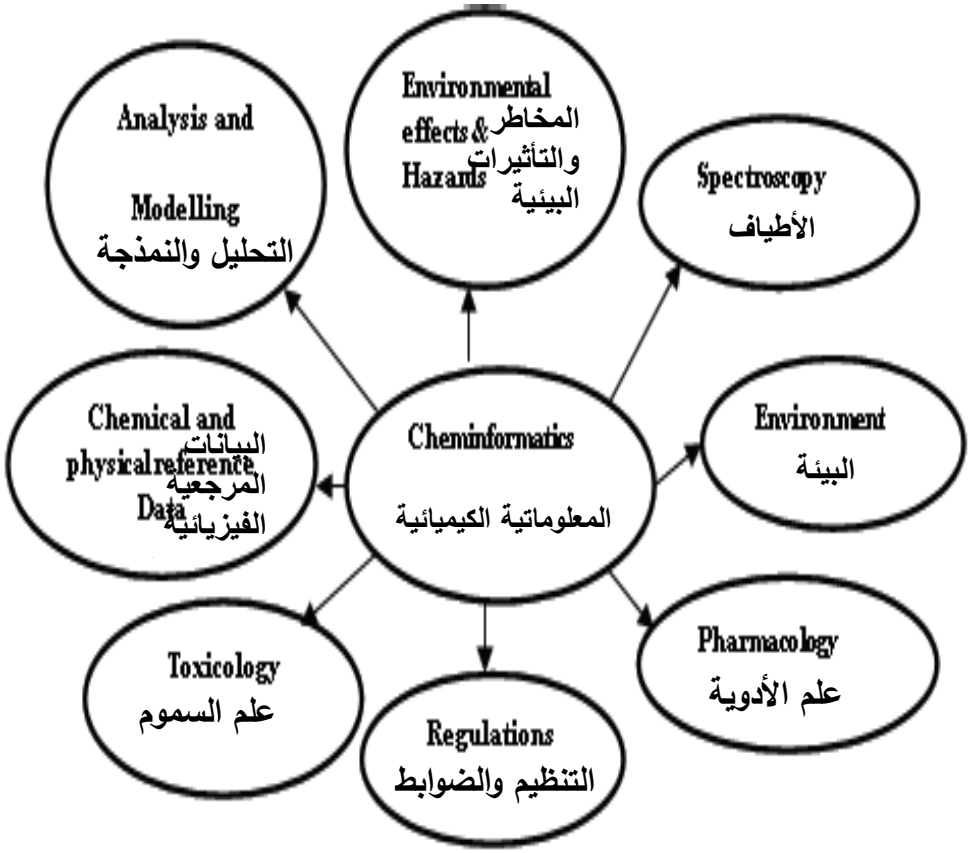
أهمية المعلوماتية الكيميائية :

تلعب المعلوماتية الكيميائية دورا رئيسا في الابقاء والحفاظ على كمية هائلة من البيانات الكيميائية، التي ينتجها الكيميائي (أكثر من ٤٥ مليون مركب كيميائي معروف وقد يزداد العدد بالمليون سنويا) باستخدام قاعدة بيانات مناسبة. أيضا، يحتاج مجال الكيمياء إلى تقنية جديدة لاستخراج المعرفة من البيانات لنمذجة العلاقات المعقدة بين بنية المركب الكيميائي والنشاط البيولوجي و تأثير شروط التفاعل على نواتج التفاعل الكيميائي. وهناك ثلاثة جوانب aspects رئيسة للمعلوماتية الكيميائية هي؛ **(Begam& Kumar, 2012: 1266):**

١. اكتساب المعلومات Information Acquisition، وهي عملية توليد وجمع البيانات من خلال التجريب أو من الناحية النظرية عن طريق (المحاكاة الجزيئية molecular simulation).

٢. إدارة المعلومات Information Management تتناول تخزين واسترجاع المعلومات.

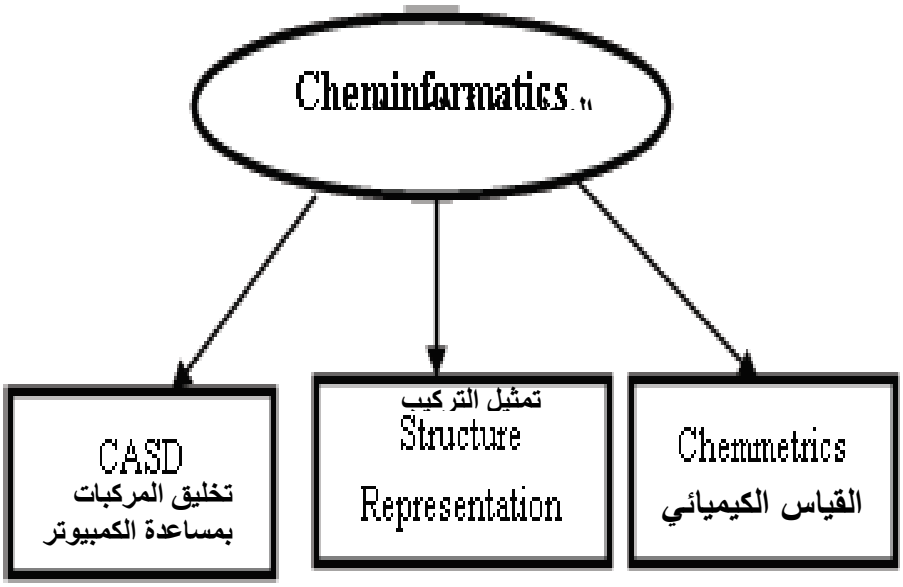
٣. استخدام المعلومات Information use ، و يتضمن تحليل البيانات، وما يرتبط بها، وتطبيقها على المشكلات في علم الكيمياء والكيمياء الحيوية Data Analysis, correlation, and application to problems in the chemical and biochemical sciences



شكل (١) الحاجة إلى المعلوماتية الكيميائية

(Begam& Kumar, 2012: 1266)

والمعلوماتية الكيميائية هى تطبيق كبير لتكنولوجيا المعلومات لمساعدة الكيميائيين لبحث مشكلات جديدة ، وتنظيم وتحليل وفهم البيانات العلمية في تطوير مركبات أصيلة ومواد وعمليات غير مألوفة . والنماذج الأولية Primary modules من المعلوماتية الكيميائية هي تخليق المركب بمساعدة الحاسوب Computer-Assisted Synthesis Design CASD ، وتمثيل التركيب Structure representation ونماذج القياس الكيميائي chemmetrics modules **(Begam& Kumar, 2012: 1266)**



شكل (٢) المجالات المختلفة للبحث في المعلوماتية الكيميائية

Different areas focused in Cheminformatics

(Begam& Kumar, 2012: 1267)

تطبيقات المعلوماتية الكيميائية: Applications of chemoinformatics

إن نطاق تطبيقات المعلوماتية الكيميائية غنى بالفعل. فالعديد من مجالات الكيمياء يمكن أن تستفيد من أساليبها (طرقها) its methods . فيما يلي قوائم المجالات المختلفة في الكيمياء ويشير إلى بعض التطبيقات النموذجية للمعلوماتية الكيميائية. **(Velingkar, Pokharna & kolhe, 2011, 74)** ، **(Bhalerao, verma, d'souza, Tell, & Didwana, 2013, 479 – 480)**

١) المعلومات الكيميائية Chemical information

- تخزين البيانات الناتجة عن التجارب أو من المحاكاة الجزيئية، واسترجاع التراكيب (الهياكل) الكيميائية chemical strucutres والبيانات المرتبطة بها لإدارة فيض البيانات the flood data
- نشر البيانات على الانترنت.
- ربط البيانات بالمعلومات. Cross – Linking of data to information
- بحث التركيب (الهيكل) والبنية التحتية والتشابه والتنوع من قاعدة البيانات الكيميائية.

٢) جميع مجالات الكيمياء All fields of chemistry

- التنبوء بالخصائص الفيزيائية أو الكيميائية أو البيولوجية للمركبات prediction of physical, chemical , or biological properties of compounds.

٣) الكيمياء التحليلية Analytical chemistry

- تحليل البيانات من الكيمياء التحليلية لعمل تنبوءات عن جودة وأصل origin وعمر الأجسام المستكشفة investigated objects
- توضيح تركيب مركب على أساس (اعتمادا على) البيانات الطيفية.

٤) الكيمياء العضوية organic chemistry

- التنبوء بمسارات ومنتجات التفاعلات العضوية.
- تصميم التوليف العضوي .design of organic syntheses

٥) تصميم الأدوية Drug design

- تحديد تركيبات lead الجديدة
- تحسين التركيبات optimization of lead structure
- انشاء علاقات النشاط – التركيب الكمية
- مقارنة المكتبات الكيميائية.
- تعريف وتحليل مخطط التنوع التركيبى (الهيكلي) للمكتبات الكيميائية.
- تحليل البيانات عالية الانتاج high – throughout data
- نمذجة خصائص ADME – TPX
- تحليل مسارات الكيمياء الحيوية biochemical pathways

قواعد بيانات المعلوماتية الكيميائية : Chemoinformatics Database

يمكن تقسيم قواعد البيانات إلى ثلاثة أنواع وهم قواعد بيانات الأدبيات Literature database، وقواعد بيانات واقعية Factual database ، وقواعد

بيانات تركيبية Structural database ولكن الفصل الصارم بين أنواع قواعد البيانات الثلاث صعب. **(Engel, 2003, 236- 241)**

أولا: قواعد بيانات الأدبيات Literature database:

قواعد بيانات الادبيات، تصف مجالات الأشياء objects باستخدام الحروف المسلسلة characters as strings مثل الاسم، الدورية، السنة، مثل :

Chemical Abstracts File (CA) of Chemical Abstracts Service (CAS)

ملف مستخلصات كيميائية الذي تقدمه خدمة المستخلصات الكيميائية

ثانيا: قواعد البيانات الواقعية Factual databases

تحتوى قواعد البيانات الواقعية بشكل اساسي على بيانات ابجدية رقمية alphanumeric data عن المركبات الكيميائية . على العكس من قواعد بيانات الادبيات حيث تصف قواعد البيانات الواقعية بشكل مباشر الاشياء objects (البيانات الاساسية عن المركبات الكيميائية) والمعلومات المطلوبة عنها. مثل Chemline and MRCK

ثالثا: قواعد بيانات التركيب Structure databases

تحتوى قواعد بيانات التركيب structure database معلومات عن التراكيب الكيميائية والمركبات chemical structures and compounds ، وتخزن مخططات digrams التراكيب أو المركبات على هيئة جداول اتصال connect tables . وتنقسم إلى قواعد بيانات تركيب وقواعد بيانات تفاعل reaction databases

قواعد بيانات التفاعل reaction databases

وتحتوي معلومات عن التفاعلات الكيميائية، والمشاركين في التفاعل (المتفاعلات والنواتج) reaction participants وشروط التفاعل مثل Cheminform

تدريس المعلوماتية الكيميائية teaching chemoinformatics :

هناك ضرورة لتدريس مجال المعلوماتية الكيميائية في الأوساط الأكاديمية in academia من خلال مقررات متخصصة في المعلوماتية الكيميائية ومن خلال دمج المعلوماتية الكيميائية فى مناهج الكيمياء العادية regular chemistry curricula. **(Gasteiger, 2003, 13)**

لطالما أدرك معلمي الكيمياء أهمية تعليم طلابهم المعلوماتية الكيميائية وكُتبت العديد من المقالات عن المقررات المستقلة وعن الجهود التي تركز على

تدريس موضوعات خاصة specific topics ضمن مقرر أو اثنين. **(Somerville & Susan,2003, 574)**

وفي الحقيقة ، قد بدأت بالفعل مناهج المعلوماتية الكيميائية في جامعة شيفلد بالمملكة المتحدة University of Sheffield ، وجامعة مانشيستر معهد العلوم والتكنولوجيا بالمملكة المتحدة University of Manchester institute of science and technology ، والجامعة الهندية ، الولايات المتحدة الأمريكية USA ، وجامعة ستراسبورج بفرنسا the université de Strasbourg . **(Gasteiger, 2003, 13)**

ومن الدراسات التي اهتمت بتضمين المعلوماتية الكيميائية في المرحلة الجامعية ما يلي:-

قامت دراسة وايت، وبيرنا & كارلسون **(White, Perna & Carlson, 2005)** بتطوير مناهج الكيمياء بالمرحلة الجامعية باستخدام المعلوماتية الكيميائية حيث قامت بتطوير مناهج دراسية نظرية ومعملية a lecture and laboratory curriculum لطلاب البيولوجي من خلال تقديم علاقات التركيب الكيميائي ويستخدم الجزء المعملي في هذا المنهج برامج في المعلوماتية الكيميائية Cheminformatics التي توفر تغذية راجعة فورية لمساعدة الطلاب على تطوير فهم العلاقة بين التركيب Structure والكراهية للماء Hydrophobicity . ويمثل مقرر علم الاحياء العام الأول في جامعة Umass Boston مقرر تمهيدى لتخصصات الأحياء يغطى علم الوراثة والكيمياء والكيمياء الحيوية والبيولوجيا الجزيئية والسرطان. حيث يحضر الطلاب ثلاث محاضرات (٥٠ دقيقة) ومعمل واحد (٣ ساعات) في الأسبوع . ويتكون قسم الكيمياء في علم الأحياء العام I من خمس محاضرات عن البنية الذرية والروابط التساهمية والهياكل الجزيئية والتفاعلات غير التساهمية. يتم تعزيز هذه المفاهيم من خلال مجموعة من المشكلات المتعلقة بالممارسة غير المتدرجة وجلسات معملية لمدة ٣ ساعات . ولتقييم فعالية هذا المنهج، تم قياس فهم الطلاب باستخدام استبانة تمت صياغتها في مشكلات مفتوحة النهاية Open – ended problem based survey وأوضحت النتائج تحسن استجابات الطلاب بعد تنفيذ الأنشطة التى تم وضعها مما يشير إلى إنها أدوات فعالة. كما أن هذا المنهج تم استخدامه لدراسات التركيب - الوظيفة المستقبلية في الكيمياء والكيمياء الحيوية والبيولوجيا الجزيئية.

ومن الدراسات التي اهتمت بتضمين المعلوماتية الكيميائية ضمن برامج إعداد معلم الكيمياء بالمرحلة الجامعية ما يلي:

دراسة أجلي، بورتر، روهتين & توفام **(Yeagley; Porter; Rhoten& Topham, 2016)** والتى هدفت إلى تضمين تقنيات ومهارات المعلوماتية الكيميائية في جميع مناهج الكيمياء الدراسية للمرحلة الجامعية بدلا من

التركيز على مقرر واحد. ولتحقيق هذه الغاية قامت الدراسة بإنشاء العديد من المقررات بدءاً من السنة الأولى (خلال الأربع سنوات). بحيث يكون لدى الطالب عند الانتهاء من تلك المقررات فهم أكبر. حيث قام قسم الكيمياء بجامعة Longwood university (LU) بتقديم مدخل خطوة الصخر The Stepping Stone Approach (SSA) وفي المدخل تم وضع قائمة بالتقنيات الرئيسة والمهارات اللازمة لثقافة المعلوماتية الكيميائية. تم تدريسها بمدخل متدرج بدءاً من مقررات المستوى الأدني Stepping Stones وتنتهي في مقررات السنة الدراسية الرابعة على هيئة مشروع Capstones وتضمن مدخل SSA بجامعة Longwood المقررات التالية

كود المقرر	مرحلة البرنامج	عنوان المقرر	السنة الدراسية
CHEM213	Stepping stone	كيمياء عضوية I (معمل)	١
CHEM214	Stepping stone	كيمياء عضوية II (معمل)	٢
CHEM350	Bridging	تحليل كيفي (محاضرة ومعمل)	٣
CHEM351		التحليل Instrument anlysis (محاضرة)	
CHEM301		مقدمة في حل مشكلات معمل الكيمياء (معمل)	
CHEM402	Capstone	حل مشكلات معمل الكيمياء المتقدم I محاضرة	٤
		حل مشكلات معمل الكيمياء المتقدم II معمل	

وأوضحت الدراسة الحاجة إلى ضرورة غرس تقنيات المعلوماتية الكيميائية والمهارات مباشرة في المناهج الدراسية. وأن امتلاك الطلاب إلى معرفة محتوى الكيمياء ليس بالضرورة يمتلك المهارت اللازمة لتبادل تلك المعرفة والمصادر لبحث المعلوماتية الكيميائية ومعالجتها.

وقامت دراسة جاكوبس، دلال & داوسون **(Jacobs ; Dalal & Dawson, 2016)** بدمج تعليم المعلوماتية الكيميائية إلى مناهج الكيمياء حيث طورت جامعة رايدر Rider university ، تعليم المعلوماتية الكيميائية من جلسات وجها لوجهه إلى موديولات عبر الانترنت لتضمين مهارات التنور المعلوماتى في مقرر الكيمياء العضوية II وتضمن المقرر برنامج تعليمي الكتروني The e – tutorial من سلسلة من سبع موديولات .

الاتجاهات العالمية لتضمين المعلوماتية الكيميائية فى المناهج الدراسية*:

توجد اتجاهات عدة لتضمين المعلوماتية الكيميائية بالمناهج الدراسية بالمرحلة الجامعية ففي اليابان ومنذ عام ٢٠٠٩ ، تم تنظيم أول ورشة مدرسية في فصل الخريف في المعلوماتية الكيميائية Autumn school of chemoinformatics في جامعة طوكيو The university of Tokyo تهدف إلى تأسيس أساس أكثر قوة من Chemoinformatics في اليابان . وبالفعل في هذا الوقت، تجمع أكثر من ١٠٠ باحث نشط من الأوساط الأكاديمية والصناعية لهذا الحدث، الذي أظهر بوضوح مجتمع معلوماتية كيميائية مزدهر في اليابان. يستهدف تعليم الطلاب وتكوين العلاقات بين الأوساط الأكاديمية والصناعة. وتم تكرار الخريف باستمرار في المعلوماتية الكيميائية في جامعة طوكيو في عام ٢٠١١ ، وفي نارا Nara في عام ٢٠١٣ ، لمناقشة أساس ومنظور المعلوماتية الكيميائية فيما يتعلق بكل من الأساليب والتطبيقات. وعقدت ورشة مدرسة الخريف الرابعة في Chemoinformatics في جامعة طوكيو في عام ٢٠١٥. **(Fuatsu, 2014,712)**

وفي **الولايات المتحدة الإمريكية** يُقدم قسم الكيمياء بكلية العلوم بشيكاغو Colloge of science (Chicago) بمعهد التكنولوجيا Illionis institute of technology مقرر المعلوماتية الكيميائية CHEM 452 Chemoinformatics ، ويُقدم هذا المقرر مقدمة عن المعلوماتية الكيميائية ونظرة عامة عن تكنولوجيا الحاسوب والطرق الحاسوبية لبحث وتصور وتحليل وإدارة البيانات والمعلومات الكيميائية والكيميائية الحيوية Chemical and biochemical data and information ومن الموضوعات المتضمنة تمثيل التراكيب الكيميائية ثنائية وثلاثية الأبعاد والتفاعلات الكيميائية ، والترميز الجزيئي، وقواعد بيانات التركيب الكيميائي ، والبيانات الكيميائية وواصفات التركيب، وتصور البيانات والتخطيط غير الخطي، وتصميم قواعد البيانات وإدارتها، تحليل البيانات البيولوجية والكيميائية، المعلوماتية الكيميائية في التفاعل الكيميائي والخصائص و الكيمياء التحليلية والتحليل الطيفي chemoinformatics in chemical reaction and property, analytical, and spectral analysis

وفي **روسيا** تقدم جامعة ITMO بسانت بترسبرج Saint Petersburg في روسيا بالشراكة مع جامعة ستراسبورج the University of Strasbourg بفرنسا برنامج الماجستير في المعلوماتية الكيميائية والنمذجة الجزيئية Chemoinformatics and molecular modeling ومدة الدراسة بالبرنامج سنتان (١٢٠ ساعة معتمدة) بما في ذلك ١-٢ فصول دراسية في جامعة

* تم عرض قائمة بالمراجع التي تناولت الاتجاهات العالمية وهى مدرجة بقائمة المراجع بنهاية البحث

ستراسبورج Strasbourg . ويتضمن محتوى البرنامج المعلوماتية الكيميائية chemoinformatics ، الكيمياء الجزيئية molecular chemistry ، و التحليل الطيفي البصري Optical spectroscopy ، وعلم المواد Material Science، الديناميكا الحرارية والحركية Kinetics and Thermodynamics ، أنظمة التشغيل والشبكات Operating systems and networks ، طيف NMR NMR-spectroscopy ، الكيمياء الكهربائية Electrochemistry، قواعد البيانات Databases ، استخلاص البيانات Data mining ، تصميم الدواء Drug design ، علم الأحياء الهيكلية والنمذجة Structural biology and modeling ، كيمياء الكم Quantum chemistry.

ويقدم أيضا معهد الكيمياء Alexander Butlerov Institute of Chemistry بجامعة قازان الاتحادية Kazan Federal University بالشراكة مع جامعة ستراسبورغ the University of Strasbourg بفرنسا برنامج الماجستير في المعلوماتية الكيميائية والنمذجة الجزيئية Chemoinformatics and molecular modeling ومدة الدراسة بالبرنامج سنتان (١٢٠ ساعة معتمدة) . ويتضمن البرنامج مقررات عامة مثل المعلوماتية الكيميائية chemoinformatics ، الكيمياء الجزيئية molecular chemistry ، كيمياء الكم Quantum chemistry ، تصميم الدواء Drug design ، المعلوماتية الحيوية Bioinformatics ، وادراة قواعد البيانات Database management; استخلاص البيانات Data mining ، المشاكل الفلسفية في الكيمياء Philosophical problems of chemistry , تقنيات الحاسوب في العلم والتعليم Computer technologies in science and education، المشكلات الفعلية في الكيمياء Actual problems of modern chemistry، الكيمياء الحيوية Biochemistry, النظريات الحديثة في الرابطة الكيميائية Modern theories of chemical bonding . ومقررات تخصصية منها أساسيات الكيمياء Fundamentals of Chemistry , اساسيات علم الاحياء Fundamentals of Biology، الديناميكا الدوائية والحركية الدوائية Pharmacodynamics and pharmacokinetics, ميكانزمات التفاعل الكيميائي Mechanisms of chemical reactions , علم القياس الكيميائي Chemometrics , الطرق الفيزيائية لدراسة المركبات العضوية Physical methods of studying organic compounds , التركيب الإلكتروني والمكاني للجزيئات Electronic and spatial structure of molecules، الأيض وسمية المواد العضوية Metabolism and toxicity of organic substances, المواد النانوية و الانظمة النانوية

Nanomaterials and nanosystems

وبفرنسا تقدم جامعة لويس باستور بمدينة ستراسبورج the Louis Pasteur university of Strasbourg تدريس المعلوماتية الكيميائية كمجال منفرد individual discipline في المرحلة الجامعية والماجستير والدكتوراه . حيث يتم تقديم مقرر مقدمة في المعلوماتية الكيميائية لطلاب السنة الثالثة بالمرحلة الجامعية. بالاضافة إلى برنامج الماجستير في المعلوماتية الكيميائية والنمذجة الجزيئية Chemoinformatics and molecular modeling.

و بالمملكة المتحدة البريطانية في جامعة يورك university of york وبقسم الكيمياء department of chemistry يتم تقديم موديول المعلوماتية الكيميائية ضمن مقررات المرحلة الجامعية ويتضمن الموديول موضوعات: البرمجة العملية practical programming يتم من خلاله السماح بتطوير برنامج لحل المشكلات في سياق الكيمياء ، و علم القياس الكيميائي chemometrics ، و الجزيئيات في الحاسوب molecules in computers .

وفي **ايرلندا** في الجامعة الوطنية ، بجالوى National University of Ireland Galway (NUI Galway) , يتم تقديم مقرر المعلوماتية الكيميائية و السمية Cheminformatics and Toxicology كاحد مقررات الماجستير بكلية الطب، التمريض، علوم الصحة College of Medicine, Nursing, & Health Sciences, لاستخدام التقنيات الحاسوبية لحل مشكلات الكيمياء والصيدلة والسموم ويقوم الطلاب بفهم وتطبيق مجموعة من الأدوات الحاسوبية لمعالجة مسائل السمية في إطار التحضير للعمل في مجال التنبؤ بالسمية في صناعة الدواء ، والصناعة ، والاستشارات ، والأوساط الأكاديمية والحكومية ويتم تدريس هذا المقرر على مدى عام واحد من قبل تخصصات الصيدلة والعلاج والرياضيات والكيمياء.

و في **التشيك** Czech تقدم كلية العلوم جامعة مازاريك Masaryk university برنامج ماجستير المعلوماتية الكيميائية والمعلوماتية الحيوية Chemoinformatics and bioinformatics مدة الدراسة بالبرنامج عامين يتم من خلال البرنامج تقديم العديد من المقررات من ضمنها: مقرر مشروع المعلوماتية الكيميائية والمعلوماتية الحيوية C5003 project from chemoinformatics and bioinformatics في الفصل الدراسي الأول 1^{st} semester , ومقرر مشروع المعلوماتية الكيميائية والمعلوماتية الحيوية C5002 project from chemoinformatics and bioinformatics في الفصل الدراسي الثاني 2^{nd} semester ، ومقرر المعلوماتية الكيميائية المتقدمة C2136 Advanced chemoinformatics وسمينار المعلوماتية الكيميائية المتقدمة C2137 Advanced chemoinformatics seminar في الفصل الدراسي الثالث 3^{nd} semester ، ومقرر مشروع المعلوماتية الكيميائية والمعلوماتية

الحيوية C5002 project from chemoinformatics and bioinformatics في الفصل الدراسي الرابع 4nd semester.

وفي **ايطاليا** تقدم المعلوماتية الكيميائية ضمن المقررات التى تقدمها جامعة alma mater studiorum università di Bologna ويتضمن محتوى مقرر المعلوماتية الكيميائية chemoinformatics: التراكيب الجزيئية ثنائية الابعاد 2D molecular structures، التراكيب ثلاثية الابعاد 3D molecular structures، الواصفات الجزيئية وطرق بحث التشابه Molecular descriptors and methods for similarity searching , طرق QSAR (العلاقة الكيمة بين النشاط – التركيب). QSAR (Quantitative Structure Activity Relationship) methods .

وفي **المانيا** تقدم المعلوماتية الكيميائية ضمن مقررات الدراسة التي تقدمها جامعة the university of Erlangen – Nuremberg بالمانيا لدرجة البكالوريوس في العلوم الجزيئية Molecular science

يتضح مما سبق :

- اهتمام بعض الدراسات بتقديم المعلوماتية الكيميائية لبرامج الكيمياء بالمرحلة الجامعية مثل **(White, Perna & Carlson, 2005)**
- اهتمام بعض الدراسات بتقديم المعلوماتية الكيميائية لبرامج إعداد معلم الكيمياء بالمرحلة الجامعية مثل **(Jacobs ; Dalal & Dawson, 2016) ، (Yeagley; Porter; Rhoten& Topham, 2016)**
- توجه العديد من بلدان العالم إلى ضرورة تضمين المعلوماتية الكيميائية ضمن برامج الكيمياء في المرحلة الجامعية وإمكانية تقديمها سواء ضمن مقررات الكيمياء او كمقررات منفصلة

ومن هنا سعى البحث الحالى إلى تطوير برامج إعداد معلم الكيمياء بكليات التربية في ضوء المعلوماتية الكيميائية

إجراءات البحث :

للإجابة عن تساؤلات البحث تم اتباع الإجراءات الأتية:

أولا: إعداد استطلاع رأي بمجالات المعلوماتية الكيميائية وتطبيقاتها التي ينبغي تضمينها في برامج إعداد معلم الكيمياء.

للإجابة عن السؤال الأول من أسئلة البحث وهو ما مجالات المعلوماتية الكيميائية وتطبيقاتها التي ينبغي تضمينها فى برامج إعداد معلم الكيماء ؟ تم إعداد استطلاع رأي بمجالات المعلوماتية الكيميائية وتطبيقاتها التي ينبغي تضمينها فى برامج إعداد معلم الكيماء من خلال الخطوات الأتية:

١. **تحديد الهدف من استطلاع الرأي:**

هدف الاستطلاع إلى تحديد مجالات المعلوماتية الكيميائية وتطبيقاتها من حيث أهميتها ومدى مناسبتها لبرامج إعداد معلم الكيمياء من وجهة نظر السادة أعضاء هيئة التدريس المتخصصين.

٢. **مصادر اشتقاق بنود استطلاع الرأي:**

تم اشتقاق بنود استطلاع الرأي الخاص بالمعلوماتية الكيميائية وتطبيقاتها من عدة مصادر كما هو موضوح بملحق ٢ *

٣. **صياغة بنود استطلاع الرأي:**

تمت صياغة بنود استطلاع الرأي فى صورة عبارات تقريرية وأمام كل عبارة مستويين المستوى الأول للحكم على مستوى الأهمية ويتضمن تدريج ثلاثى (مهم جدا، مهم إلى حد ما، غير مهم) والمستوى الثاني للحكم على مدى مناسبة البند لبرامج إعداد معلم الكيمياء ويتضمن استجابتين (مناسب، غير مناسب).

٤. **الصورة الأولية لاستطلاع الرأي:**

اشتملت الصورة الأولية لآستطلاع الرأى محورين وهما:

المحور الأول : المعلوماتية الكيميائية ويتضمن المفاهيم الأساسية المرتبطة بالمعلوماتية الكيمياء وتطبيقات المعلوماتية الكيميائية وقواعد بيانات المعلوماتية الكيميائية وأدواتها والمجالات المتعلقة بالمعلوماتية الكيميائية وقد تضمن المحور الأول (٦٠) بند كالتالي:

* ملحق (٢): الصورة النهائية لاستطلاع الرأى حول المعلوماتية الكيميائية

جدول (٢) يوضح المحور الأول من استطلاع الرأى

المحور		الابعاد	عدد البنود
المحور الأول: المعلوماتية الكيمائية	١	ماهية المعلوماتية الكيميائية ونشأتها والجذور العلمية للمعلوماتية الكيميائية.	٣ ثلاثة بنود
	٢	المقاهيم الأساسية المرتبطة بالمعلوماتية الكيمائية.	٤ أربعة بنود
	٣	تطبيقات المعلوماتية الكيميائية.	١٧سبعة عشر
	٤	قواعد بينات المعلوماتية الكيميائية.	١٧ سبعة عشر
	٥	أدوات وبرامج المعلوماتية الكيميائية.	١٠ عشر بنود
	٦	المجالات المتعلقة بالمعلوماتية الكيميائية.	٩ تسعة بنود
		المجموع	٦٠

المحور الثاني: مجالات المعلوماتية الكيميائية وتطبيقاتها وتضمن ستة مجالات انتظمت في ٢١ بندا ولكل مجال تطبيقاته الخاصة

جدول (٣) يوضح المحور الثاني من استطلاع الرأى

المحور		المجال	عدد بنود التطبيقات
المحور الثاني : مجالات المعلوماتية الكيمائية وتطبيقاتها	١	الكيمياء الطبية (تصميم الأدوية)	٧ سبعة بنود
	٢	الكيمياء التحليلية	٦ ستة بنود
	٣	الكيمياء العضوية	٢ بندان
	٤	الكيمياء الحيوية	٤ أربعة بنود
	٥	تصميم المبيدات	١ بند واحد
	٦	التنبؤ بالسمية وتقييم المخاطر	١ بند واحد
		المجموع	٢١

وتم عرض استطلاع الرأى على مجموعة من السادة المحكمين (ملحق ١)* من أعضاء هيئة التدريس للحكم على صلاحية استطلاع الرأي ومناسبته للتطبيق وضبطه

* ملحق (١): قائمة بأسماء السادة أعضاء هيئة التدريس المحكمين

٥. الصورة النهائية لاستطلاع الرأي:

تم التوصل إلى الصورة النهائية لاستطلاع الرأى (ملحق ٢)* بعد إجراء بعض التعديلات في ضوء أراء السادة المحكمين متمثلة في إعادة صياغة بعض البنود مرة أخري.

٦. تطبيق استطلاع الرأي :

تم تطبيق استطلاع الرأي على مجموعة من أعضاء هيئة التدريس تخصص الكيمياء بكلية العلوم جامعة بنها وتخصص مناهج وطرق تدريس العلوم بكلية التربية جامعة بنها وعددهم ثلاثون لتحديد مدى تكرارات أهمية ومناسبة البنود المقدمة باستطلاع الرأي بمجالات المعلوماتية الكيميائية وتطبيقاتها التي ينبغي تضمينها في برامج إعداد معلم الكيمياء بكليات التربية **وأوضحت النتائج أن النسبة المئوية لتكررات الأهمية تراوحت بين (٤٣%: ١٠٠%) في حين تراوحت نسبة مدى المناسبة لبنود الاستطلاع ما بين (٦٣%: ١٠٠%)

ثانياً : إعداد قائمة بالمعايير التي ينبغي توافرها في مقررات الكيمياء بكليات التربية في ضوء المعلوماتية الكيميائية.

للإجابة عن السؤال الثاني من تساؤلات البحث وهو ما المعايير التي ينبغي توافرها في مقررات الكيمياء بكليات التربية في ضوء المعلوماتية الكيميائية؟ تم إعداد قائمة من المعايير التي ينبغي توافرها فى مقررات الكيمياء ببرامج إعداد معلم الكيمياء بكليات التربية في ضوء المعلوماتية الكيميائية وذلك كالتالي:

١) الهدف من القائمة : تهدف القائمة إلى تحديد المعايير الخاصة بمجالات وتطبيقات المعلوماتية الكيمائية التى ينبغي توافرها فى مقررات الكيمياء ببرامج إعداد معلم الكيمياء بكليات التربية .

٢) مصادر اشتقاق قائمة المعايير : تم اشتقاق قائمة المعايير إعتمادا على :

- نتائج استطلاع الرأي حيث تم التركيز في قائمة المعايير على البنود التي نسبة الاتفاق على أهميتها مرتفعة في حين تم استبعاد البنود التى نسبة الاتفاق على أنها غير هامة أو غير مناسبة مرتفعة
- الادبيات والدراسات السابقة في مجال المعلوماتية الكيميائية.

* ملحق (٢) : الصورة النهائية لاستطلاع الرأى حول المعلوماتية الكيميائية

** ملحق (٣): تكرارت درجة الأهمية ومدى المناسبة، النسبة المئوية لبنود استطلاع رأي خاص بالمعلوماتية الكيميائية chemoinformatics

٣) الصورة النهائية لقائمة المعايير: تم وضع الصورة النهائية لقائمة المعايير * حيث تناولت المعايير الخاصة بالمعلوماتية الكيميائية وتضمنت القائمة المعايير التالية:

- المعلوماتية الكيميائية ونشأتها
- المفاهيم الأساسية المرتبطة بالمعلوماتية الكيميائية Fundamental Concepts
- تطبيقات المعلوماتية الكيميائية والطرق الحاسوبية للمعلوماتية الكيميائية

بالاضافة إلى معايير مجالات المعلوماتية الكيميائية وتطبيقاتها المتمثلة في :

- مجال الكيمياء الطبية medicinal chemistry (تصميم الأدوية) Drug design
- الكيمياء التحليلية Analytical chemistry (مجال القياس الكيميائي Chemometrics)
- الكيمياء العضوية Organic Chemistry
- الكيمياء الحيوية Biochemistry نمذجة النظم البيولوجية Biological Systems Modeling الكيمياء الحيوية Biochemistry نمذجة النظم البيولوجية Modeling Biological Systems
- تصميم المبيدات Pesticide Design
- التنبؤ بالسمية وتقييم المخاطر Toxicity Prediction and Risk Assessment

ثالثا : تحليل مقررات الكيمياء المقدمة ببرنامج إعداد معلم الكيمياء خلال الفرق الأربع بكلية التربية جامعة بنها.

اعتماداً على قائمة المعايير التي تم إعدادها تم إعداد أداة تحليل لمقررات الكيمياء** تتضمن تسعة معايير وتضمنت تلك المعايير ٤٦ مؤشرا للأداء لتحديد مدي تضمين المعلوماتية الكيميائية خلال مقررات الكيمياء المقدمة ببرامج إعداد معلم الكيمياء واتضح من تحليل المقررات غياب المعلوماتية الكيميائية عن المقررات الدراسية المقدمة خلال الفرق الاربع ببرنامج إعداد معلم الكيمياء بكلية التربية جامعة بنها

* ملحق (٤) : قائمة المعايير الخاصة بالمعلومات الكيميائية

** ملحق (٥) بطاقة أداة تحليل المحتوى مقررات الكيمياء في ضوء معايير المعلوماتية الكيميائية

ووجود فقط فقرات مبسطة عن بعض المعلومات المرتبطة ببعض المجالات المعلوماتية الكيميائية.

ويمكن توضيح نتائج تحليل المقررات فيما يلي

- غياب كافة معايير المعلوماتية الكيميائية ومؤشرات الأداء المتضمنة بكل معيار في مقررات الكيمياء المقدمة للفرق الاربع بقسم الكيمياء بكلية التربية باستثناء وجود معلومات مرتبطة بمعيار الكيمياء التحليلية (مؤشر التنبؤ بمعلومات التركيب الكيميائي من البيانات الطيفية) وهي معرفة الحالة الفيزيائية للمركبات من خلال الطيف بمقرر الكيمياء الطيفية، التعرف على نوع الذرات والروابط الموجودة في الجزئ من خلال تحليل طيف الامتصاص للأشعة تحت الحمراء، وطرق التحليل الطيفي.
- وجود معلومات مرتبطة بمعيار الكيمياء العضوية Organic Chemistry (مؤشر نمذجة خصائص ADMET (الامتزاز، والتوزيع، والتمثيل الغذائي، والإفراز، والسمية)) وهى معلومات مرتبطة بعملية الامتزاز. في مقرر كيمياء السطوح.

رابعاً : إعداد التصور المقترح لتطوير برامج إعداد معلم الكيمياء بكليات التربية في ضوء المعلوماتية الكيميائية.

للإجابة عن السؤال الثالث من أسئلة البحث وهو ما التصور المقترح لتطوير برنامج اعداد معلم الكيمياء بكليات التربية في ضوء مجالات المعلوماتية الكيميائية وتطبيقاتها؟ تم إعداد التصور المقترح في ضوء قائمة المعايير التي تم إعدادها والمتضمنة المعاييير التي ينبغي توافرها في مقررات الكيمياء ببرامج إعداد معلم الكيمياء. حيث تم بناء التصور المقترح وفقاً للمراحل التالية:

المرحلة الأولى: صياغة الأهداف العامة للتصور المقترح.

المرحلة الثانية: إعداد وصياغة بنية التصور المقترح للمعلوماتية الكيميائية وتطبيقاتها.

المرحلة الثالثة: تحديد أساليب تضمين التصور المقترح ببرامج إعداد معلم الكيمياء بكليات التربية.

المرحلة الأولى: صياغة الأهداف العامة للتصور المقترح.

يهدف التصور المقترح إلى عدد من الأهداف العامة تتضح فيما يلي:

١) اكتساب المعرفة المرتبطة بمفهوم المعلوماتية الكيميائية والمجالات المتضمنة فيها، ونشأتها.

٢) اكتساب المفاهيم العلمية المرتبطة بالمعلوماتية الكيميائية.مثل الفراغ الكيميائي، الواصفات الجزيئية، المسافات الكيميائية، التشابه الجزيئي، الاختلاف الجزيئي والتنوع.
٣) معرفة أنواع الواصفات الجزيئية وأهميتها (استخداماتها) في مجالات الكيمياء.
٤) معرفة طرق وأسس(معايير) انتقاء المركبات الكيميائية.
٥) معرفة دور المعلوماتية الكيميائية في نمذجة علاقات النشاط- التركيب والخصائص الكمية والكيفية وتطبيقاتها في مجلات الكيمياء.
٦) التعرف على الرسم البياني الجزيئي molecular graph.
٧) التعرف على طرق تمثيل ومعالجة التركيبات الجزيئية ثنائية الأبعاد كأحد تطبيقات المعلوماتية الكيميائية.
٨) معرفة تمثيل ومعالجة التركيبات الجزيئية ثلاثية الأبعاد.
٩) معرفة تطبيقات المعلوماتية الكيميائية في الكيمياء الطبية (اكتشاف الأدوية) مثل دراسة نماذج التنبؤ بالخصائص الكيميائية (تنبؤ ADME) – عملية اكتشاف الأدوية الحديثة باستخدام المعلوماتية الكيميائية.
١٠) دراسة تطبيقات ميكانيكا الكم والميكانيكا الجزيئية في المعلوماتية الكيميائية
١١) دراسة تطبيقات المعلوماتية الكيميائية في مجال الكيمياء التحليلية (مجال القياس الكيميائي) مثل تصنيف العينات التحليلية باستخدام الطرق الحاسوبية ، استخدام الطرق الرياضية لتحليل البيانات
١٢) معرفة تطبيقات المعلوماتية الكيميائية فى الكيمياء العضوية.
١٣) التعرف على برنامج المعلوماتية الكيميائية لتصميم المبيدات
١٤) معرفة النماذج الحاسوبية المستخدمة للتنبؤ بالسمية وتقييم المخاطر.

المرحلة الثانية: إعداد وصياغة بنية التصور المقترح لتطوير برنامج إعداد معلم الكيمياء لطلاب كليات التربية في ضوء المعلوماتية الكيميائية للمعلوماتية الكيميائية وتطبيقاتها.

يتكون التصور المقترح للمعلوماتية الكيميائية وتطبيقاتها لبرامج إعداد معلم الكيمياء من العناصر التالية:

- الأهداف والمحتوى.
- استراتيجيات التدريس والأنشطة التعليمية والوسائل التعليمية.
- أساليب التقويم وأدواته.

وفيما يلي سيتم تناول تلك العناصر بالتفصيل:

أ. الأهداف والمحتوى:

تم صياغة أهداف للتصور المقترح بناءً على الأهداف العامة للتصور المقترح التي تم صياغتها ومن خلال الأهداف تم تحديد محتوى المعلوماتية الكيميائية

جدول (٤) التصور المقترح لتطوير برامج إعداد معلم الكيمياء بكليات التربية في ضوء المعلوماتية الكيميائية وتطبيقاتها.

الأهداف	المحتوى
المعلوماتية الكيميائية : مفهومها ، ونشأتها	
	ماهيه المعلوماتية الكيميائية
▪ معرفة مفهوم المعلوماتية الكيميائية والمجالات المتضمنة فيها	• مفهوم المعلوماتية الكيميائية chemoinformatics • المجالات المتضمنة في المعلوماتية الكيميائية
▪ معرفة المصطلحات المختلفة للمعلوماتية الكيميائية.	• المصطلحات المختلفة للمعلوماتية الكيميائية
▪ معرفة نشأة المعلوماتية الكيميائية	• نشأة المعلوماتية الكيميائية
المفاهيم المرتبطة بالمعلوماتية الكيميائية Fundamental Concepts	
	• الواصفات الجزيئية والمسافات الكيميائية • Molecular descriptors and chemical spaces
▪ معرفة المقصود بالفراغ الكيميائي وأهميته. ▪ معرفة المقصود بالواصفات الجزيئية ▪ تحديد أنواع الواصفات الجزيئية. ▪ دراسة أمثلة للواصفات الجزيئية وفقا لفئاتها.	• مفهوم الفراغ الكيميائي chemical spaces • الواصفات الجزئية Molecular descriptors • أنواع الواصفات الجزيئة. • أمثلة للواصفات الجزيئة.
▪ تحديد المقصود بالمسافات الكيميائية والتشابة الجزيئي ▪ تحديد المقصود بالاختلاف الجزيئي ▪ تحديد المقصود بالتنوع الجزئي ▪ التعرف على أهمية دراسة الاختلاف الجزئي	• المسافات الكيميائية والتشابه (التماثل) الجزيئي • Chemical spaces and molecular similarity • التشابه (التماثل) والاختلاف الجزيئي والتنوع • Molecular similarity, dissimilarity, and diversity
	• تعديل وتبسيط المسافات الكيميائية • Modification and simplification of chemical spaces
تطبيقات المعلوماتية الكيميائية	
	▪ تصنيف وانتقاء المركبات • Compound classification and selection

الأهداف	المحتوى
▪ معرفة طرق تصنيف المركبات وتحديد معايير (أسس) انتقائها. ▪ معرفة المقصود بالتحليل العنقودي ▪ تحديد تقنيات/ مداخل الطرق العنقودية لتقسيم المركبات ▪ معرفة خوارزميات تقسيم المركبات ▪ التمييز بين استخدامات التحليل العنقودى وخوارزميات التقسيم	• التحليل العنقودى Cluster analysis • خوارزميات التقسيم partitioning algorithms
• معرفة آلات ناقلات الدعم كأحد الطرق (المداخل الحاسوبية) في المعلوماتية الكيميائية المستخدمة لانتقاء المركبات الكيميائية	• آلات ناقلات الدعم • Support vector machines (SVMs)
▪ التعرف على طرق نمذجة الخصائص كميا ▪ التعرف البارامترات المستخدمة لدراسة العلاقة التركيب والنشاط	▪ نمذجة علاقات النشاط- التركيب والخصائص الكمية والكيفية • Quantitive and Qualitative Structure-Activity Relationship modeling • طرق نمذجة علاقات النشاط – التركيب • البارامترات المستخدمة لدراسة العلاقة التركيب والنشاط • أهمية دراسة العلاقات بين النشاط – التركيب الكمية
التعرف على دور تكنولوجيا المعلومات في حل مشكلات الكيمياء	▪ نظرية المعلومات المطبقة على مشكلات الكيمياء • Information theory applied to chemical problems
معرفة دور النماذج الاحصائية والواصفات في علم الكيمياء	▪ النماذج الاحصائية والواصفات في الكيمياء • Statistical models and descriptors in chemistry
معرفة الخصائص الحيوية لمركبات الكائنات الحية.	▪ التنبؤ بخصائص مركبات الجسم الحي • Prediction of in vivo compound characteristics
• معرفة نظم التمثيل ثنائي الأبعاد جزئيات المركبات وكيفية التعامل معها. • معرفة المقصود بالرسم البياني للتمثيلات النظرية للتركيبات الكيميائية ▪ تحديد أنواع الرسم البياني للتمثيلات النظرية للتركيبات الكيميائي	▪ تمثيل ومعالجة التركيبات الجزيئية ثنائية الابعاد. • Representation and manipulation of 2d Molecular structures • الرسم البيانى للتمثيلات النظرية للتركيبات الكيميائية • Graph theoretic representations of chemical structures

الأهداف	المحتوى
▪ معرفة المقصود بالرسم البيانى للجزئي Molecular graph ▪ تحديد مكونات الرسم البيانى للجزئي Molecular graph ▪ معرفة أمثلة للرسم البيانى للجزئي Molecular graph لبعض المركبات الكيميائية.	• الرسم البيانى للجزئي Molecular graph
▪ معرفة المقصود الرسم البيانى الثانوى للجزئي subgraph ▪ تحديد مكونات الرسم البيانى الثانوى للجزئي subgraph ▪ معرفة أمثلة للرسم البيانى الثانوى للجزئي subgraph لبعض المركبات الكيميائية.	• الرسم البيانى الثانوى للجزئي subgraph
▪ معرفة الشجرة كنوع خاص من الرسم البياني tree وتحديد مكوناتها. ▪ معرفة مدلول كل مكون من مكونات الشجرة ▪ معرفة أمثلة للشجرة كنوع خاص من الرسم البياني tree	• الشجرة كنوع خاص من الرسم البياني tree
	• جداول الاتصال والترميز الخطي • Connection table and linear Nations • التمثيلات للتركيبات الجزئية • Canonical representations of molecular structures
▪ التعرف على تمثيلات المركبات الكيميائية ثلاثية الأبعاد.	▪ تمثيل ومعالجة التركيبات الجزيئية ثلاثية الابعاد. • Representation and manipulation of 3d Molecular structures
	• التنبوء بالخصائص الفيزيائية والكيميائية والبيولوجية للمركبات الكيميائية
• التعرف على الخصائص الفيزيائية والكيميائية والبيولوجية للمركبات العضوية • التعرف على طرق التنبوء بالخصائص الفيزيائية والكيميائية والبيولوجية للمركبات العضوية	
Medicinal Chemistry (Drug discovery) الكيمياء الطبية (اكتشاف الأدوية)	
تطبيقات المعلوماتية الكيميائية في اكتشاف ادوية **The application of chemoinformatics in drug discovery**	
▪ التعرف على المهام الرئيسة لاختيار المركب ▪ التعرف على خوارزميات اختيار المركب	• اختيار المركب • compound selection
▪ التعرف على المكتبات الإفتراضية ومعايير انشائها,	• إنشاء المكتبات الإفتراضية • Virtual library generation

الأهداف	المحتوى
▪ التعرف على الفحص الافتراضي	• الفحص الإفتراضي • Virtual Screening
▪ التعرف على التنبوء بخصائص ADMET باستخدام الحاسب	• ADMET in silico
• معرفة كيفية التنبوء بخصائص ADME للمركبات الكيميائية. ▪	• التنبؤ بخصائص ADME للمركبات الكيميائية. • Predicting ADME properties of chemicals
• معرفة نماذج التنبؤ بالخصائص الفيزيائية والكيميائية.	• نماذج التنبؤ بالخصائص الكيميائية والفيزيائية. • Physicochemical property prediction models
• معرفة المقصود بالمفاهيم المرتبطة بالتنبؤ بالخصائص الكيميائية والفيزيائية مثل طاقة الإذابة الحرة ، ثابت التأين، الشحمية / الانجذاب، الذوبانية.	• طاقة الإذابة الحرة • Solvation free Energy (AG solv) • ثابت التأين. • Ionization constant (PK_a) • الشحمية / الانجذاب • Lipohilicity (log p) • الذوبانية • Solubility log s
▪ معرفة العمليات المتضمنة في نموذج تنبوء MADE	• نموذج تنبؤ ADME • ADME prediction model • الامتصاص • Absorption • التوزيع • Distribution • التمثيل الغذائي • Metabolism • الإخراج/ الافراز • Excretion
▪ التعرف على دور المعلوماتية الكيميائية وتطبيقاتها في صناعة الأدوية.	• عملية اكتشاف الأدوية الحديثة باستخدام المعلوماتية الكيميائية • Modern drug discovery process
• تطبيقات ميكانيكا الكم والميكانيكا الجزيئية في المعلوماتية الكيميائية • on of quantum mechanics and molecular mechanics in chemoinformaticsApplicati	
▪	• بارامترات الكم الكيميائية للمعلوماتية الكيميائية • Quantum chemical parameters for chemoinformatics
▪ معرفة الشحنات الذرية كأحد البراميترات الأساسية المستخدمة في QSAR ▪ تحديد أهمية الشحنات الذرية ▪ معرفة التقنيات المتنوعة المستخدمة لحساب الشحنات الذرية	• الشحنات الذرية • c chargesAtomi • اهمية الشحنات الذرية • التقنيات المتنوعة لتوليد الشحنات الذرية خلال التحليل الشائع • various techniques to generate atomic

الأهداف	المحتوى
▪ معرفة طريقة Mulliken لحساب الشحنات الذرية ▪ معرفة كيفية استخدام طريقة ميليكن Mulliken's Method لحساب الشحنات الذرية.	• طريقة Mulliken charges through population analysis • Mulliken's Method • استخدام طريقة ميليكن Mulliken's Method لحساب الشحنات الذرية.
• معرفة تقنية Lowdin لحساب الشحنات الذرية ▪ معرفة كيفية استخدام تقنية Lowdin Technique لحساب الشحنات الذرية. • معرفة تحليل اوربتالات الرابطة الطبيعي لحساب الشحنات الذرية • معرفة كيفية استخدام معادلة تحليل اوربتالات الرابطة الطبيعي لحساب الشحنات الذرية. ▪ المقارنة بين تقنيات توليد (حساب) الشحنات الذرية.	• تقنية Lowdin • Lowdin Technique • استخدام معادلة Lowdin Technique لحساب الشحنات الذرية. • تحليل اوربتالات الرابطة الطبيعي • Natural bond orbital (NBO) analysis • استخدام معادلة تحليل اوربتالات الرابطة الطبيعي لحساب الشحنات الذرية.
▪	• الخصائص الأخرى المرتبطة بالشحنة • Other charge related properties
• معرفة المقصود بالكثافة المدارية للحد ▪ معرفة المقصود بالبعد الفائق • معرفة المقصود بلحظة ثنائي القطب ▪ معرفة المقصود بالاستقطاب ▪ معرفة المقصود بالاستقطاب الشديد	• الكثافة المدارية للحد • Frontier orbital densities • البعد الفائق • Superdelocalizability • لحظة ثنائي القطب • dipole moment • الاستقطاب • Polarizability • الاستقطاب الشديد • Hyperpolarizability
▪	• الطاقة الكلية وطاقة الاوربتال والخصائص المرتبطة
▪ معرفة استخدامات الطاقة الكلية للجزئ E لحساب العديد من خصائص الجزئ المتضمنة : ✓ جهد التأين Ionization potential IP ✓ تقارب (انجذاب) الإلكترون ✓ طاقة البروتونات	• استخدام الطاقة الكلية للجزئ E لحساب العديد من خصائص الجزئ المتضمنة : ✓ جهد التأين Ionization potential IP ✓ تقارب (انجذاب) الإلكترون ✓ طاقة البروتونات
▪ معرفة استخدامات طاقة الاوربتالات لحساب تفاعلية الجزيئات reactivity of molecules	▪ معرفة استخدامات طاقة الاوربتالات لحساب تفاعلية الجزيئات reactivity of molecules
▪	• الخصائص الجزيئية المرتبطة بالسطح • Molecular surface – related properties
▪ معرفة المقصود بالجهد الالكتروستاتيكى الجزئيى	• الجهد الالكتروستاتيكي الجزيئي • Molecular electrostatic potential

الأهداف	المحتوى
▪ التعرف على الواصفات المستندة إلى نظرية الذرات في الجزئ	• الواصفات المستندة إلى نظرية الذرات في الجزئ • Atoms in Molecule (AIM) theory based descriptors.
▪ التعرف على فنيات الكم الكيميائية كمصدر لتوليد بارامترات	• التقنيات الكيميائية الكمية كمصدر لتوليد البارامترات. • Quantum chemical techniques as source of parameter generations
▪ التعرف على استخدامات الميكانيكا الجزيئية لدراسة QASR	• الميكانيكا الجزيئية ودراسة QASR • Molecular Mechanics and QASR (the well – known Quantitative structure – activity relationship.
تطبيقات المعلوماتية الكيميائية فى الكيمياء التحليلية Analytical chemistry **مجال القياس الكيميائي Chemometrics**	
▪ التعرف على كيفية تصنيف العينات التحليلية باستخدام الطرق الحاسوبية	• تصنيف العينات التحليلية باستخدام الطرق الحاسوبية • the classification of analytical samples
• التعرف على كيفية استخدام تقنيات تمثيل البيانات	• استخدام تقنيات تمثيل البيانات • The data representation techniques
▪ استخدام الطرق الرياضية لتحليل البيانات	• الطرق الرياضية لتحليل البيانات • the mathematical methods for data analysis
▪ معرفة كيفية التنبوء بمعلومات التركيب الكيميائي من البيانات الطيفية	• (التنبوء بمعلومات التركيب الكيميائي من البيانات الطيفية) • the prediction of chemical structure information from spectroscopic data
▪ معرفة كيفية تمثيل الأشياء الكيميائية بواسطة قياس البيانات وتحليل تلك البيانات من خلال استخدام الطرق الحسابية	• تمثيل الأشياء الكيميائية بواسطة قياس البيانات وتحليل تلك البيانات من خلال استخدام الطرق الحسابية
▪ استخدام تطبيق التركيب بمساعدة الحاسوب (CASE) لنمذجة العلاقات بين تركيب المركب وبياناته الطيفية	• نمذجة العلاقات بين تركيب المركب وبياناته الطيفية باستخدام توضيح التركيب بمساعدة الحاسوب (CASE) • Modeling the relationships between the structure of a compound and its spectral data by using Computer-assisted structure elucidation (CASE)
• **تطبيقات المعلوماتية الكيميائية في الكيمياء العضوية Organic Chemistry**	
• التعرف على طريقة تصميم التوليف بمساعدة الكمبيوتر للمركبات العضوية	• تصميم التوليف بمساعدة الكمبيوتر للمركبات العضوية • computer-assisted synthesis design

الأهداف	المحتوى
(CASD)	
• التعرف على كيفية التنبوء بالتفاعل الكيميائي ومسار التفاعلات الكيميائية	• التنبوء بالتفاعل الكيميائي ومسار التفاعلات الكيميائية • the prediction of chemical reactivity and of the course of chemical reactions
▪ **تصميم المبيدات تصميم المبيدات Pesticide Design**	
▪ التعرف على برنامج / مشروع المعلوماتية الكيميائية لتصميم المبيدات	• برنامج / مشروع المعلوماتية الكيميائية لتصميم المبيدات • Chemoinformatics Platform for Pesticide Design
▪ **التنبؤ بالسمية وتقييم المخاطر Toxicity Prediction and Risk Assessment**	
▪ معرفة النماذج الحاسوبية المستخدمة للتنبؤ بالسمية ومخاطر المركبات الكيميائية	• نماذج حاسوبية للتنبؤ بالسمية وتقييم مخاطر المركبات الكيميائية • computational models for toxicity prediction and risk assessment of chemicals
▪ استخدام النماذج الحاسوبية للسمية لدراسة تأثير المواد الكيميائية على البيئة والانسان	• نماذج السمية الحاسوبية للسمية لدراسة تأثير المواد الكيميائية على البيئة والانسان

ب. استراتيجيات التدريس والأنشطة التعليمية والوسائل التعليمية:

يعتمد تدريس التصور المقترح على استخدام العديد من الاستراتيجيات التي تتمركز حول الطالب منها خرائط التفكير، الخريطة الذهنية، الاستقصاء، استراتيجية العصف الذهنى، استراتيجية حل المشكلة، استراتيجية التعلم بالاكتشاف .....

بالأضافة إلى بعض الأنشطة التعليمية واستخدام مواقع الانترنت وعرض الفيديوهات التعليمية وبعض مواقع برامج تطبيقات المعلوماتية الكيميائية.

ج. أساليب التقويم وأدواته:

يمكن استخدام العديد من الأساليب للتقويم من خلال الأسئلة التحريرية والعملية والشفوية.

المرحلة الثالثة: تحديد أساليب تضمين التصور المقترح ببرامج إعداد معلم الكيمياء بكليات التربية.

يمكن تضمين التصور المقترح للمعلوماتية الكيميائية وتطبيقاتها كمقررات منفصلة خلال برنامج إعداد معلم الكيمياء أو يتم تضمين بعض محاور التصور المقترح في مقررات الكيمياء المقدمة.

جدول (٥) تضمين التصور المقترح في مقررات الكيمياء

المقررات	الأهداف	المحتوى
• مقررات الكيمياء العامة	• معرفة الشحنات الذرية كأحد البارامترات الأساسية المستخدمة في QSAR	• الشحنات الذرية
	• تحديد أهمية الشحنات الذرية	• اهمية الشحنات الذرية
	• معرفة التقنيات المتنوعة المستخدمة لحساب الشحنات الذرية	• التقنيات المتنوعة لتوليد الشحنات الذرية خلال التحليل التالي
	• معرفة طريقة Mulliken لحساب الشحنات الذرية	• طريقة Mulliken • Mulliken's Method
	• معرفة كيفية استخدام طريقة ميليكان Mulliken's Method لحساب الشحنات الذرية.	• استخدام طريقة ميليكان Mulliken's Method لحساب الشحنات الذرية.
	• معرفة تقنية Lowdin لحساب الشحنات الذرية	• تقنية Lowdin
	• معرفة كيفية استخدام تقنية Lowdin Technique لحساب الشحنات الذرية.	• استخدام معادلة Lowdin Technique لحساب الشحنات الذرية.
	• معرفة تحليل اوربيتالات الرابطة الطبيعي لحساب الشحنات الذرية	• تحليل اوربيتالات الرابطة الطبيعي • Natural bond orbital (NBO) analysis
	• معرفة كيفية استخدام معادلة تحليل اوربيتالات الرابطة الطبيعي لحساب الشحنات الذرية.	• استخدام معادلة تحليل اوربيتالات الرابطة الطبيعي لحساب الشحنات الذرية.
	• المقارنة بين تقنيات حساب الشحنات الذرية.	
		• الخصائص الأخرى المرتبطة بالشحنة
	• معرفة المقصود بالكثافة المدارية للحد	• الكثافة المدارية للحد • Frontier orbital densities
	• معرفة المقصود بالبعد الفائق	• البعد الفائق • Superdelocalizability

المقررات	الأهداف	المحتوى
	• معرفة المقصود بلحظة ثنائي القطب	• لحظة ثنائي القطب • dipole moment
	• معرفة المقصود بالاستقطاب	• الاستقطاب • Polarizability
	• معرفة المقصود بالاستقطاب الشديد	• الاستقطاب الشديد • Hyperpolarizability
		• الطاقة الكلية وطاقة الاوربتال والخصائص المرتبطة
	• معرفة استخدامات الطاقة الكلية للجزيء E لحساب العديد من خصائص الجزيء المتضمنة : ✓ جهد التأين Ionization potential IP ✓ تقارب (انجذاب) الإلكترون ✓ طاقة البروتونات	• استخدام الطاقة الكلية للجزيء E لحساب العديد من خصائص الجزيء المتضمنة : ✓ جهد التأين Ionization potential IP ✓ تقارب (انجذاب) الإلكترون ✓ طاقة البروتونات
		✓ طاقة البروتونات
	• معرفة استخدامات طاقة الاوربيتالات لحساب تفاعلية الجزيئات reactivity of molecules	• معرفة استخدامات طاقة الاوربيتالات لحساب تفاعلية الجزيئات reactivity of molecules

• مقررات الكيمياء العضوية	• التعرف على طريقة تصميم التوليف بمساعدة الكمبيوتر للمركبات العضوية	• تصميم التوليف بمساعدة الكمبيوتر للمركبات العضوية • computer-assisted synthesis design (CASD)
	• التعرف على كيفية التنبوء بالتفاعل الكيميائي ومسار التفاعلات الكيميائية	• التنبوء بالتفاعل الكيميائي ومسار التفاعلات الكيميائية • the prediction of chemical
		• reactivity and of the course of chemical reactions

المقررات	الاهداف	المحتوى
• مقررات الكيمياء التحليلية + مقررات الكيمياء الطبية	• التعرف على كيفية تصنيف العينات التحليلية باستخدام الطرق الحاسوبية	• تصنيف العينات التحليلية باستخدام الطرق الحاسوبية • the classification of analytical samples
	• التعرف على كيفية استخدام تقنيات تمثيل البيانات	• استخدام تقنيات تمثيل البيانات • The data representation techniques
	• استخدام الطرق الرياضية لتحليل البيانات	• الطرق الرياضية لتحليل البيانات • the mathematical methods for data analysis
	• معرفة كيفية التنبوء بمعلومات التركيب الكيميائي من البيانات الطيفية	• التنبوء بمعلومات التركيب الكيميائي من البيانات الطيفية • chemical structure information from spectroscopic data
	• معرفة كيفية تمثيل الأشياء الكيميائية بواسطة قياس البيانات وتحليل تلك البيانات من خلال استخدام الطرق الحسابية	• تمثيل الأشياء الكيميائية بواسطة قياس البيانات وتحليل تلك البيانات من خلال استخدام الطرق الحسابية
	• استخدام تطبيق التركيب بمساعدة الحاسوب (CASE) لنمذجة العلاقات بين تركيب المركب وبياناته الطيفية	• نمذجة العلاقات بين تركيب المركب وبياناته الطيفية باستخدام توضيح التركيب بمساعدة الحاسوب(CASE) Computer-assisted structure elucidation (CASE)
• كيمياء السطوح	• التعرف على التنبوء بخصائص ADMET باستخدام الحاسب	• in silico ADMET
	• معرفة كيفية التنبوء بخصائص ADME للمركبات	• التنبؤ بخصائص ADME للمركبات الكيميائية.

المقررات	الاهداف	المحتوى
	• الكيميائية.	• Predicting ADME properties of chemicals
		• نماذج التنبؤ بالخصائص الكيميائية والفيزيائية. • Physicochemical property prediction models
	• معرفة نماذج التنبؤ بالخصائص الفيزيائية والكيميائية.	
	• معرفة المقصود بالمفاهيم المرتبطة بالتنبؤ بالخصائص الكيميائية والفيزيائية مثل طاقة الإذابة الحرة ، ثابت التاين، الشحمية / الانجذاب، الذوبانية.	• طاقة الإذابة الحرة • Solvation free Energy (AG solv)
		• ثابت التاين. • Ionization constant (PK_a)
		• الشحمية / الانجذاب • Lipohilicity (log p)
		• الذوبانية • Solubility log s
	• معرفة العمليات المتضمنة في نموذج تنبوء MADE	• نموذج تنبؤ ADME • ADME prediction model
		• الامتصاص • Absorption
		• التوزيع • Distribution
		• التمثيل الغذائي • Metabolism
		• الإخراج/ الافراز • Excretion
علم البيئة	• التعرف على برنامج / مشروع المعلوماتية الكيميائية لتصميم المبيدات	• برنامج / مشروع المعلوماتية الكيميائية لتصميم المبيدات • Chemoinformatics Platform for Pesticide Design

المقررات	الاهداف	المحتوى
	• معرفة النماذج الحاسوبية المستخدمة للتنبؤ بالسمية ومخاطر المركبات الكيميائية	• نماذج حاسوبية للتنبؤ بالسمية وتقييم مخاطر المركبات الكيميائية • computational models for toxicity prediction and risk assessment of chemicals
	• استخدام النماذج الحاسوبية للسمية لدراسة تأثير المواد الكيميائية على البيئة والانسان	• نماذج السمية الحاسوبية للسمية لدراسة تأثير المواد الكيميائية على
		• البيئة والانسان

خامساً: قياس فاعلية وحدة من التصور المقترح :

للإجابة عن السؤال الرابع من أسئلة البحث : ما فاعلية وحدة من التصور المقترح لتطوير برامج إعداد معلم الكيمياء في كليات التربية على تحصيل الجانب المعرفي للمعلوماتية الكيميائية؟ تم بناء وحدة **"المعلوماتية الكيميائية وميكانيكا الكم"** من التصور المقترح المقدم من خلال إجراء الخطوات التالية:

١) إعداد كتاب الطالب في وحدة المعلوماتية الكيميائية وميكانيكا الكم:

اشتمل كتاب الطالب على مقدمة لكتاب الطالب تضمنت فكرة مبسطة عن المعلوماتية الكيميائية. المحتوى العلمي لكتاب الطالب: تم تحديد المحتوى العلمي لموضوعات كتاب الطالب بناءاً على الأهداف والموضوعات التى تمت صياغتها في التصور المقترح من خلال الاعتماد على المراجع العلمية التى تناولت تلك الموضوعات. واشتملت أساليب التقويم للوحدة على مستويين التقويم البنائي والتقويم النهائي. وفي نهاية الوحدة تم تحديد قائمة بالمراجع العلمية المرتبطة بموضوعات الوحدة وايضا مواقع الكترونية لمصادر التعلم ومقاطع الفيديو. وقد تضمنت الوحدة سبعة موضوعات كما هو موضح بالجدول (٦) التالي:

جدول (٦) قائمة موضوعات المعلوماتية الكيميائية التي تم تضمينها في كتاب الطالب

م	الموضـــــــــــــوع
الموضوع الأول	المعلوماتية الكيميائية
الموضوع الثاني	الشحنات الذرية
الموضوع الثالث	الخصائص الاخري المرتبطة بالشحنات الذرية.
الموضوع الرابع	واصفات التفاعل.
الموضوع الخامس	نظرية الحمض – القاعدة الصلب والمرن
الموضوع السادس	الواصفات الوظيفية للكثافة المحلية
الموضوع السابع	واصفات حامضية وقاعدية الرابطة الهيدروجينية.

وبعد إعداد كتاب الطالب تم عرض كتاب الطالب على السادة المحكمين وتم إجراء التعديلات التى تم الاشارة إليها وبذلك أصبح كتاب الطالب في صورته النهائية *.

٢) إعداد دليل المحاضر(الأستاذ) في وحدة المعلوماتية الكيميائية وميكانيكا الكم:

يهدف دليل المحاضر تحديد الإجراءات التي ينبغي على المحاضر اتباعها لتدريس موضوعات المعلوماتية الكيميائية.

وقد روعي فى إعداد هذا الدليل ما يلى:

- تحديد أهداف كل موضوع بصورة إجرائية.
- تحديد الوسائل التعليمية المستخدمة لتنفيذ كل موضوع.

* ملحق (٦): كتاب الطالب وحدة المعلوماتية الكيميائية وتطبيقاتها.

- تحديد طريقة السير فى الدرس.

وتضمن دليل المحاضر:

١. **المقدمـــــــة**: وتضمنت الهدف من دليل المحاضر، ونبذة موجزة عن المعلوماتية الكيميائية.
٢. **توجيهات عامة للمحاضر:** اشتمل الدليل على مجموعة من الإرشادات والتوجيهات التى ينبغي على المحاضر مراعاتها عند تدريس وحدة المعلوماتية الكيميائية وميكانيكا الكم.
٣. **الخطـة الزمنيـة**: واشتملت بيان بعدد الجلسات المقترحة لتدريس موضوعات المعلوماتية الكيميائية والتى بلغت تسع جلسات.
٤. **خطة السير في الموضوعات المقدمة:** تم عرض الموضوعات بعد تحديد الأهداف المرجوة لكل منها، والوسائل التعليمية المساعدة على تحقيقه، ثم عرض خطة السير فى الدرس، والخطوات الإجرائية التى يتبعها المحاضر لتدريس تلك الموضوعات وفى نهاية الدرس تم عرض مجموعة من أسئلة التقويم لكل موضوع.

وتم عرض دليل المحاضر على السادة المحكمين وتم إجراء التعديلات التي تمت الإشارة إليها، وبذلك أصبح الدليل فى صورته النهائية*.

٣) إعداد اختبار الجانب المعرفي للمعلوماتية الكيميائية:

تحديد الهدف من الاختبار:

يهدف هذا الاختبار إلى قياس الجانب المعرفي للمعلوماتية الكيميائية .

وصف الاختبار:

يتكون الاختبار من ٢٧ مفردة من نوع الاختيار من متعدد، لقياس الجانب المعرفي للمعلوماتية الكيميائية.

تعليمات الاختبار:

تضمنت تعليمات الاختبار ما يلي:

- يجب الالتزام بتعليمات الاختبار.
- ضرورة الإجابة عن كل الأسئلة.
- تظليل الرمز الدال على الاجابة الصحيحة أ ، ب، ج ، د

جدول مواصفات الاختبار

* ملحق (٧) : دليل المعلم فى وحدة المعلوماتية الكيميائية وميكانيكا الكم.

جدول (٧) مواصفات الاختبار

الموضوع	الصفحات		الجلسات		متوسط	الأسئلة	عدد الأسئلة
	العدد	النسبة	العدد	النسبة	النسبة		
الأول	٢	٥,٣	١	١١,١	٨,٢	٢٤ ،١	٢
الثاني	٥	١٣,٢	١	١١,١	١٢,١٥	٢،٣،٦	٣
الثالث	٦	١٥,٨	١	١١,١	١٣,٤٥	١٧،٢٦، ٤،٩	٤
الرابع	١٠	٢٦,٣١	٣	٣٣,٣	٢٩,٨١	٧،٨،١١،١٢،١٣،١٩،٢٠،٢٥	٨
الخامس	٧	١٨,٤٢	١	١١,١	١٤,٧٦	٢٣/٢٢/١٨/١٥	٤
السادس	٦	١٥,٨	١	١١,١	١٣,٤٥	٢١/١٦/١٠/٥	٤
السابع	٢	٥,٢	١	١١,١	٨,٢	٢٧ ،١٤	٢
المجموع	٣٨	١٠٠	٩	١٠٠	١٠٠	٢٧	٢٧

صدق الاختبار:

صدق المحكمين:

للتأكد من صدق الاختبار تم عرض الاختبار على مجموعة من السادة المحكمين من أعضاء هيئة التدريس بكلية التربية وكلية العلوم جامعة بنها لإبداء آرائهم حول:

- مدى مناسبة تلك المهام لطلاب الفرقة الثالثة شعبة الكيمياء بكلية التربية
- مدى كفاية المعلومات المقدمة في كل مهمة للطلاب للإجابة بطريقة صحيحة على الاختبار.
- حذف الأسئلة التي يصعب على الطلاب حلها.
- تعديل أو صياغة بعض الأسئلة لتصبح أكثر وضوحا.
- تقديم أي مقترحات أخرى.

الدراسة الاستطلاعية للاختبار:

تم إجراء الدراسة الاستطلاعية على مجموعة من طلاب الفرقة الرابعة شعبة الكيمياء بكلية التربية جامعة بنها وعددها ٤١ طالب وطالبة وذلك لحساب معاملي صدق وثبات الاختبار كالتالي:

أ) حساب صدق الاختبار:

تم التأكد من صدق الاختبار من خلال **الصدق التكويني**:

وتم حساب الصدق التكويني للاختبار من خلال حساب:

- معامل الاتساق الداخلي بين درجة المفردة و الدرجة الكلية للاختبار محذوفاً منها درجة النشاط في تلك المهارة.

جدول (٨) مؤشرات الصدق التكويني لمفردات اختبار الجانب المعرفي للمعلوماتية الكيميائية ن =٤١.

المفردة	الدرجة الكلية محذوفاً منها درجة المفردة	المفردة	الدرجة الكلية محذوفاً منها درجة المفردة
١	٠.٥١٠**	١٥	٠.٥٥٢**
٢	٠.٦٤٠**	١٦	٠.٧٦٦**
٣	٠.٣٥٩*	١٧	٠.٤٣١**
٤	٠.٣٩٩**	١٨	٠.٤١٠**
٥	٠.٥٣٤**	١٩	٠.٤٤١**
٦	٠.٤٨٢**	٢٠	٠.٤٨١**
٧	٠.٤٧٩**	٢١	٠.٤٥٦**
٨	٠.٤٦٩**	٢٢	٠.٥١٩**
٩	٠.٣٦٠*	٢٣	٠.٦٢٥**
١٠	٠.٣٩٠*	٢٤	٠.٥٢٢**
١١	٠.٣٢٨*	٢٥	٠.٣٠٩*
١٢	٠.٤٨٩**	٢٦	٠.٣٢٠*
١٣	٠.٦٥٥**	٢٧	٠.٦٥٩**
١٤	٠.٥٤٨**		

ويتضح من الجدول السابق أن قيم معاملات الارتباط بين درجة المفردة والدرجة الكلية للاختبار تراوحت بين (٠.٣٠٩: ٠.٧٦٦) وجميعها قيم مرتفعة و دالة عند مستوى٠.٠٥، ٠.٠١ مما يحقق الصدق التكويني للاختبار.

ب) ثبات الاختبار:

تم حساب ثبات الاختبار من خلال ثلاث طرق وهى: ألفا كرونباخ و سبيرمان وبراون، وطريقة جتمان. كالتالي.

جدول (٩) ثبات اختبار الجانب المعرفي للمعلوماتية الكميائية

طريقة حساب ثبات الاختبار	معامل ألفا كرونباخ	طريقة سبيرمان وبراون	طريقة جتمان
معامل ثبات الاختبار	٠.٧٧	٠.٧٩٧	٠.٧٧٤

يتضح من الجدول السابق أن قيمة معامل الثبات للاختبار تتراوح فيما بين (٠.٧٧)، و (٠.٧٩٧) وهى قيم مرتفعة لمعامل ثبات الاختبار، مما يدل على ثبات الاختبار وإمكانية الوثوق فى نتائجه فى الدراسة الحالية.

وبذلك أصبح اختبار الجانب المعرفي للمعلوماتية الكيميائية في صورته النهائية* وصالحاً للتطبيق على مجموعة الدراسة.

٤) اجراءات تنفيذ تجربة البحث:

تم تطبيق أداة البحث قبليا على مجموعة الدراسة المتضمنة ١١٧ طالب وطالبة من طلاب الفرقة الثالثة شعبة الكيمياء للعام الجامعى ٢٠١٨/ ٢٠١٩ ثم تدريس الوحدة وبعد الانتهاء من تدريس الوحدة تم تطبيق الاختبار بعدياً

نتائج البحث :

تم تناول الأساليب الإحصائية المستخدمة في البحث الحالي ثم عرض النتائج الكمية التي تم التوصل إليها ومناقشتها من خلال المعالجة الإحصائية، واختبار صحة فرض البحث وتفسيرها.

أولا: الأساليب الإحصائية المستخدمة:

بعد الانتهاء من التطبيق البعدي لادأة البحث وهى اختبار الجانب الأكاديمي للمعلوماتية الكيميائية ، تم تصحيح الاختبار. وبعد ذلك تمت معالجة البيانات إحصائيا للتحقق من صحة فرض البحث والتعرف على فاعلية وحدة المعلوماتية الكيميائية وميكانيكا الكم.

ولمعالجة تلك البيانات كميا تم استخدام الأساليب الإحصائية التالية:

١) اختبار (ت) للمجموعات المرتبطة Paired Samples Test**:**

تمت المعالجة الإحصائية للبيانات باستخدام برنامج التحليل الإحصائي للعلوم الاجتماعية (SPSS) إصدار (١٧) لحساب دلالة الفرق بين متوسط درجات الطلاب في التطبيقين القبلي والبعدى في الاختبار المقدم، وذلك للتعرف على فاعلية وحدة المعلوماتية الكيميائية وميكانيكا الكم على تنمية الجانب المعرفي للمعلوماتية الكيميائية.

٢) حساب حجم الأثر للتعرف على قوة المعالجة التجريبية**:**

لحساب حجم الأثر تم حساب قيمة مربع إيتا، وذلك لمعرفة التباين في درجات المتغير التابع، والتي تعزى إلى المتغير المستقل **(الشربيني، ٢٠٠٧: ١٩٠-١٩٢).**

* ملحق (٨): اختبار الجانب المعرفي للمعلوماتية الكيميائية.

ثانيا: فاعلية الوحدة في تنمية الجانب المعرفي للمعلوماتية الكيميائية:

عرض ومناقشة النتائج المرتبطة بفرض البحث

لاختبار صحة فرض البحث والذي ينص على أنه " لايوجد فرق دال إحصائياً عند مستوى ($\alpha \leq 0.01$) بين متوسطي درجات الطلاب في التطبيقين القبلي والبعدي لاختبار الجانب المعرفي للمعلوماتية الكيميائية. والجدول التالي يوضح النتائج:

جدول (١٠) دلالة الفرق بين متوسط درجات التطبيقين القبلي والبعدي لاختبار الجانب المعرفي للمعلوماتية الكيميائية

البيان	التطبيق	المتوسط	الانحراف المعيارى	العدد	قيمة (ت)	مستوى الدلالة	قيمة مربع إيتا
الدرجة الكلية	القبلي	٦.٨٠	٢.٤٥	١١٧	٧٩.٦٥	٠.٠٠٠	٠.٩٨
	البعدي	٢٥.٦٥٨	١.٠٢٧				

يتضح من الجدول السابق ما يلي:

- يوجد فرق ذو دلالة إحصائية عند مستوى ≤ ٠.٠١ بين متوسط درجات التطبيق القبلي ومتوسط درجات التطبيق البعدي لاختبار الجانب المعرفي للمعلوماتية الكيميائية لصالح التطبيق البعدي، مما يدل على نمو وتحسن واضح في الدرجة الكلية لاختبار الجانب المعلرفي للمعلوماتية الكيميائية نتيجة الوحدة المقدمة.
- تشير قيمة مربع إيتا إلى أن حجم التأثير يشير إلى وجود درجة تأثير مرتفعة للمعالجة التجريبية المستخدمة الوحدة المقدمة على الدرجة الكلية لاختبار الجانب المعلرفي للمعلوماتية الكيميائية كما أن ٩٨% من التباين الكلي للمتغير التابع يرجع إلى المتغير المستقل مما يشير إلى وجود تأثير كبير للمعالجة التجريبية المستخدمة في تنمية الجانب المعرفي للمعلوماتية الكيميائية.

قياس فاعلية الوحدة باستخدام معادلة Cohen's d :-

جدول (١١) حساب فاعلية الوحدة باستخدام Cohen's d لاختبار الجانب المعرفي للمعلوماتية الكيميائية

فرق المتوسطات Means	SD	T	√N	d	الدلالة
١٨.٨٥٥	٢.٥٦	٧٩.٦٥	√117	٧.٤	دالة

يتضح من الجدول السابق أن قيمة Cohen's d هى ٧.٤ وهي قيمة دالة ومتوسطة بالنسبة لاختبار الجانب المعرفي للمعلوماتية الكيميائية وتشير إلى أن وحدة المعلوماتية الكيميائية وميكانيكا الكم من التصور المقترح ذو فاعلية في تنمية الجانب المعرفي للمعلوماتية الكيميائية.

ويمكن تفسير النتائج كالتالي:

- تتناسب المعلوماتية الكيميائية مع المرحلة الجامعية وهذا يتفق مع دراسة **(White, Perna & Carlson, 2005)**
- تتناسب المعلوماتية الكيميائية مع برامج إعداد معلم الكيمياء ويمكن تقديمها من خلال برامج إعداد معلم الكيمياء **(Jacobs ; Dalal & Dawson, 2016) ، (Yeagley; Porter; Rhoten& Topham, 2016)**
- تكامل تصميم الوحدة الدراسية وحداثة موضوعاتها جذبت الطلاب مجموعة الدراسة وأثارت حب استطلاعهم لمعرفة تلك الموضوعات.
- تدعيم الوحدة الدراسية بالعديد من الأنشطة التي تطلبت مشاركة الطلاب والوصول بأنفسهم للمعرفة ساعد على تنمية المعلومات المتضمنة بالوحدة لديهم
- تدعيم الوحدة الدراسية بالعديد من المصادر والفيديوهات والبرامج ساعد على جذب انتباه الطلاب وساعد على تنمية الجانب المعرفي للمعلوماتية الكيميائية لديهم .

المـــراجـــــع

المراجع العربية

الشربينى، زكريا (٢٠٠٧). *الإحصاء وتصميم التجارب في البحوث النفسية والتربوية والاجتماعية*. القاهرة: مكتبة الأنجلو المصرية.

المراجع الاجنبية

Begam, B. F & .Kumar, J. S. (2012). A study on chemoinformatics and its application on modern drug discovery. International conference on modeling optimisation and computing – (ICMOC-1212) ,*procedia engineering, 38*.١٢٧٥ – ١٢٦٤ ,

Bhalerao ,S.A.; Verma, D.R.; D'souza, R. L. ; Teli, N. C & . Didwana, V. S .(٢٠١٣) .Chemoinformatics: The application of informatics methods to solve chemical problems . *Research journal of pharmaceutical, biological and chemical sciences,4*٤٩٩-٤٧٥ ,

Bishop, N ;.Gillet, V. J. ; Holliday, J. D & .Willett, P. (2003). Chemoinformatics research at the University of Sheffield: A history and citation analysis .*Journal of information science, 29* .٢٦٧ – ٢٤٩ ,(٤)

Brown, N .(٢٠٠٩) .Chemoinformatics – An introduction for computer scientists. ACM computing surveys, 41(2), 8:1 – 8:38.

Bunin, B. A ;.Bajorath, J.; Siesel, B & .Morales, G .(٢٠٠٧) . *Chemoinformatics: Theory ,practice, and products* . Springer, the Netherlands.

Engel, T .(٢٠٠٣) .Databases and sources in chemistry. In Gasteiger, J & .Engel, T .(Eds.). Chemoinformatics: A

textbook .WILLEY -CVH Verlag GmbH &Co. KGaA, weinheim (Germany).

Funatsu, K .(٢٠١٤) .*Chemoinformatics in japan* .Molecular informatics, 33, 712 .

Gasteiger, J .(٢٠٠٣) .Introduction. In Gasteiger, J & .Engel, T. (Eds.). Chemoinformatics :A textbook . WILLEY- CVH Verlag GmbH &Co. KGaA, , weinheim (Germany).

Gasteiger, J .(٢٠١٦) .Chemoinformatics: Achievements and challenges, a personal view ,*molecules*.١٥-١ ,(١٥١) ٢١ ,

Gasteiger, J & .Polanski, J. (2017). Computer representation of chemical compounds. In :Leszczynski, Jerzy; Kaczmarek-Kedziera, A. ; Puzyn, T.; Papadopoulos, M. G ;.Reis, H & . Shukla (Eds.) .*Handbook of computational chemistry* . Second edition, speringer international publishing, Switzerland.

Jacobs, D. L ; .Dalal, H. A & .Dawson, P. H. (2016). Integrating chemical information instruction into the chemistry curriculum on borrowed Time: The Multiyear Development and Evaluation of avirtual instructional tutorial ,*Journal of chemical education, 93* .٤٦٣ -٤٥٢ ,(٣)

Parthasarathi ,R.; Elango, M.; Padmanabban, J.; Subramanian, V.; Roy, D.; Sarkar, U & .Chattaraj, P., (2006). Application of quantum chemical descriptors in computational medicinal chemistry and chemoinformatics ,*Indian Journal of Chemistry*٤٥ ,A, 111 – 125 .

Polanski, J .(٢٠٠٩) .Chemoinformatics. In: Walczak, B. (eds). Comprehensive chemoinformatics , .Elsevier.

Polanski, J & .Gasteiger, J.(2017). Computer Representation of chemical compounds. . In :Leszczynski, Jerzy; Kaczmarek-Kedziera, A. ; Puzyn, T.; Papadopoulos, M. G ;.Reis, H & . Shukla (eds.) .*Handbook of computational chemistry* .Part V chemoinformatics .Second edition, speringer international publishing, Switzerland .

Schofield, H .(٢٠٠١) .Recent developments in chemoinformatics education .*Drug Discovery Today) DDT*.٩٣٤ -٩٣١ ,(١٨)٦ , (

Somerville & Candinal, (2003). An integrated chemical information instruction program .*Journal of chemical education, 80* .٥٧٩ – ٥٧٤ ,(٥)

Velingkar, V .S., Pokharna, G & .Kolhe, N. S. (2011). Chemoinformatics: A novel tool in drug discovery . *International journal of current pharmaceutical research ,* .٧٥ – ٧١ ,٣

Vogt, M ,.Wassermann, A & .Bajorath, J. (2010). Application of Information—Theoretic Concepts in Chemoinformatics . *Information, 1* .٧٣- ٦٠ ,

Voigt, K .(٢٠٠٨) .Environmental Informatics, Environmetrics, Chemoinformatics, Chemometrics :Integration or Separation!?. 4th International Congress on Environmental Modelling and Software - Barcelona, Catalonia ,Spain - July 2008, 1594- 1601.

Wathen, S. P .(٢٠١٨) .Introduction to chemoinformatics for green chemistry education .*Physical sciences Reviews,0*٩-١ ,(٠)

White, B ;.Perna, I & .Carlson, R .(٢٠٠٥) .Multimedia in Biochemistry and Molecular Biology education: Software for teaching structure – Hydrophobicity Relationships .

Biochemistry and Molecular Biology education, 33 -٦٥ ,(١) .٧٠

Willett, P .(٢٠١١) .Chemoinformatics: a history. WIRES Computational Molecular science, 1 ,January/ February , 46-56 .

Xu, W ; .Ling, Min; Hu, J. ; Huang, Y.; Li, Jia & Xyo, J. (2013). Chemoinformatics and its applications. 1th annual international interdisciplinary conference, AIIC2013, 24 - 26 April, Azores, Portugal .

Yeagley, A .A. ; Porter, S. E. G. ; Rhoten, M. C & .Topham, B. J. , (2016). The stepping stone approach to teaching chemical information skills .*Journal of chemical Education* ٤٢٣ ,٩٣ , .٤٢٨ –

مواقع مؤتمرات المعلوماتية الكيميائية:

٩th German Conference on Chemoinformatics (GCC). 10-12 November 2013. Fulda ,Germany. Retrieved July,5 2017 From : https://jcheminf.biomedcentral.com/articles/10.1186/1758-2946-6-S1-I1

١٠th German Conference on Chemoinformatics (GCC). 01 - 05 June 2014 Noordwijkerhout ,The Netherlands. . Retrieved July,5 2017 From: https://www.chemistryviews.org/details/event/6007821/10th_International_Conference_on_Chemical_Structures_and_10th_German_Conference_.html

١١th German Conference on Chemoinformatics (GCC). 8–10 November 2015 .Fulda, Germany. Retrieved July,5 2017 From : https://www.gdch.de/index.php?id=2348

١٢th German Conference on Chemoinformatics (GCC). November 6 – 8, 2016. Fulda, German. . Retrieved July,5 2017 from : https://www.gdch.de/index.php?id=3089

GCC 2017 - 13th German Conference on Chemoinformatics. November 5-7 ,٢٠١٧ ,Mainz/Germany. . Retrieved february ,12 2018 From : https://veranstaltungen.gdch.de/tms/frontend/index.cfm?l=7380&modus =

GCC 2018, 14th German Conference on Chemoinformatics. November 11-13 ,٢٠١٨ ,Mainz/Germany. Retrieved november ,20 2017 From : https://veranstaltungen.gdch.de/tms/frontend/index.cfm?l=8085&modus =

مواقع الدوريات العالمية المتخصصة في المعلوماتية الكيميائية:

- Chem – Bio informatics Journal .Retrieved July,25 2017 from :https://www.jstage.jst.go.jp/browse/cbij/-char/en
- Chemical informatics .From : http://cheminformatics.imedpub.com/
- International Journal of Chemoinformatics and Chemical Engineering. Retrieved august ,12 2017 From : https://www.igi-global.com/journal/international-journal-chemoinformatics-chemical-engineering/1176
- Journal of Bioinformatics & Cheminformatics. Retrieved December ,23 2017 from :http://advancejournals.org/journal-of-bioinformatics-and-cheminformatics/
- Journal of chemical information and modeling. Retrieved January ,26 2018 From :https://pubs.acs.org/journal/jcisd8
- Journal of cheminformatics. Retrieved January ,26 2018 From :https://jcheminf.biomedcentral.com/

المواقع التي تناولت الإتجاهات العالمية

- Chemoinformatics and Molecular Modeling, ITMO University, Petersburg, Russia. Retrieved December, 13,2017 from : http://en.ifmo.ru/en/viewjep/2/35/Chemoinformatics_and_Molecular_Modeling.htm
- Chemoinformatics and Molecular Modelling ,Master degree program of Alexander Butlerov Institute of Chemistry , Kazan Federal University, Retrieved December, 13,2017 https://kpfu.ru/eng/academic-units/natural-sciences/alexander-butlerov-institute-of-chemistry/studies/master-studies/chemoinformatics-and-molecular-modelling
- https://kpfu.ru/eng/strau/laboratories/chemoinformatics-and-molecular-modeling-laboratory/educational-programs
- CHEM 452- Cheminformatics ,department of chemistry , colloge of science, Illinois Institute of Technology, Chicago Retrieved february ,9 2018 from : https://science.iit.edu/courses/chem452.
- Chemoinformatics ,department of chemistry, University of York ,Heslington, York, UK Retrieved february ,9 2018from : https://www.york.ac.uk/chemistry/undergraduate/courses/options/chemoinformatics/
- Cheminformatics and Toxicology ,National University of Ireland Galway (NUI Galway), Galway, Ireland. Retrieved february ,23 2018 From : http://www.nuigalway.ie/courses/taught-postgraduate-courses/cheminformatics-and-toxicology.html
- chemoinformatics and bioinformatics .Masaryk university, Czech, Retrieved february ,27 2018 from : https://www.muni.cz/en/bachelors-and-masters-study-fields/18946-chemoinformatics-and-bioinformatics#courses

- C5003 project from chemoinformatics and bioinformatics . Masaryk university, Czech, Retrieved march ,17 2018 from: https://is.muni.cz/predmet/sci/C5003?lang=en
- C5002 project from chemoinformatics and bioinformatics . Masaryk university, Czech, Retrieved march ,17 2018 from: https://is.muni.cz/predmet/sci/C5002?lang=en
- C2136 Advanced chemoinformatics .Masaryk university, Czech, Retrieved april ,10 2018 from : https://is.muni.cz/predmet/sci/C2136?lang=en
- C2137 Advanced chemoinformatics seminar ,Masaryk university, Czech, from : https://is.muni.cz/predmet/sci/C2137?lang=en
- – ٤٥٠٩٠chemoinformatics, alma mater studiorum università di Bologna, Italy, Retrieved may ,27 2018 from : https://www.unibo.it/en/teaching/course-unit-catalogue/course-unit/2016/393545