

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович  
Должность: Проректор по учебной и методической работе  
Дата подписания: 01.11.2023 16:48:04  
Уникальный программный ключ:  
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
(технический университет)»

**УТВЕРЖДАЮ**  
Проректор по учебной  
и методической работе  
\_\_\_\_\_ Б.В.Пекаревский  
«\_25\_» \_\_марта\_\_ 2019 г.

**Рабочая программа дисциплины**  
**ХИМИЧЕСКИЕ БАЗЫ ДАННЫХ**

Направление подготовки

**04.03.01 Химия**

Направленность программы бакалавриата  
**«Физическая химия и химия материалов»**

Квалификация

**Бакалавр**

Форма обучения

**Очная**

Факультет **химии веществ и материалов**

Кафедра **физической химии**

Санкт-Петербург

2019

## ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Ассистент		Субботин Д.И.

Рабочая программа дисциплины «Химические базы данных» обсуждена на заседании кафедры физической химии  
протокол от «05» февраля 2019 № 6  
Заведующий кафедрой

С.Г. Изотова

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химии веществ и материалов  
протокол от «21» марта 2019 № 6

Председатель

С.Г. Изотова

## СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления подготовки «Химия»		С.Г.Изотова
Директор библиотеки		Т.Н.Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		Т.И.Богданова
Начальник учебно-методического управления		С.Н.Денисенко

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.....	4
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.....	5
3. Объем дисциплины.....	5
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	6
4.2. Занятия лекционного типа.....	7
4.3. Занятия семинарского типа.....	9
4.3.1. Семинары, практические занятия.....	9
4.3.2. Занятия лабораторного типа.....	10
4.4. Самостоятельная работа обучающихся.....	10
4.5. Темы сообщений студентов на семинарских занятиях.....	11
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.....	12
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	12
7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины.....	13
8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.....	14
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	14
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.....	15
10.1. Информационные технологии.....	15
10.2. Программное обеспечение.....	15
10.3. Базы данных и информационные справочные системы.....	15
11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы.....	16
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.....	16
Приложение № 1.....	17

## 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

В результате освоения образовательной программы бакалавриата обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
<p><b>ПК-4</b> Способен применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов</p>	<p><b>ПК-4.В.19.1</b> Использование основных естественнонаучных законов для моделирования химического эксперимента</p>	<p><b>Знать:</b> современные программные продукты и базы данных, ориентированные на моделирование химического эксперимента (ЗН-1);</p> <p><b>Уметь:</b> задавать условия проведения вычислительного эксперимента с использованием химических баз данных (У-1);</p> <p><b>Владеть:</b> навыками использования программных продуктов для проведения вычислительного химического эксперимента и анализа полученных результатов (Н-1).</p>
<p><b>ПК-5</b> Способен получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий</p>	<p><b>ПК-5.В.19.1</b> Систематизация результатов научных экспериментов с использованием химических баз данных</p>	<p><b>Знать:</b> классификацию и структуру химических баз данных (ЗН-2)</p> <p><b>Уметь:</b> планировать и организовывать работу в химических базах данных (У-2)</p> <p><b>Владеть:</b> навыками использования химических баз данных для интерпретации результатов научных экспериментов (Н-2)</p>

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина относится к дисциплинам части, формируемой участниками образовательных отношений (Б1.В.19) и изучается на 4 курсе в 8 семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «Квантовая химия» и «Химические реакторы». Полученные в процессе изучения дисциплины «Химические базы данных» знания, умения и навыки могут быть использованы при изучении дисциплин «Химия полимеров», « Основы термодинамики неравновесных процессов», при прохождении производственной практики, а также при выполнении выпускной квалификационной работы.

## 3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, ЗЕ/академ. часов
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b> (зачетных единиц/ академических часов)	<b>4/ 144</b>
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>90</b>
занятия лекционного типа	30
занятия семинарского типа, в т.ч.	60
семинары, практические занятия	60
лабораторные работы	-
курсовое проектирование (КР или КП)	-
КСР	-
другие виды контактной работы	-
<b>Самостоятельная работа</b>	<b>54</b>
<b>Форма текущего контроля</b> (Кр, реферат, РГР, эссе)	-
<b>Форма промежуточной аттестации</b> (КР, КП , зачет, экзамен)	<b>Зачет</b>

## 4. Содержание дисциплины.

### 4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, акад. часы	Занятия семинарского типа, акад. часы		Самостоятельная работа, акад. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы			
1.	Типы химических баз данных. Базы данных научной литературы. Кристаллографические базы данных. Базы данных спектров ЯМР. Базы данных химических реакций. Теплофизические базы данных.	6	12	0	8	ПК-1	ПК-4.В.19.1
2.	Структура химических баз данных. Основные дескрипторы поиска. Использование трехмерных моделей молекул для поиска.	4	8		8	ПК-1	ПК-4.В.19.1
3.	Мерк индекс. Справочник по органической химии Бейльштейна. Химическая реферативная служба (ChemicalAbstractsService). База данных химических соединений и смесей королевского химического общества Великобритании ChemSpider. База данных лекарственных веществ DrugBank. База данных химических соединений и смесей Национального центра биотехнологической информации США PubChem. Регистр токсических эффектов химических соединений (RTECS).	6	12		8	ПК-1	ПК-4.В.19.1
4.	Программы для выполнения квантово-химических расчетов. Программа ПРИРОДА. Программа GAUSSIAN.	4	8		8	ПК-1	ПК-5.В.19.1

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, акад. часы	Занятия семинарского типа, акад. часы		Самостоятельная работа, акад. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы			
	Квантово-химический пакет «ORCA»						
5.	База данных NIST ChemistryWebBook. База данных Национальной медицинской библиотеки США ChemIDplus. База данных по синтезу химических веществ и физическим свойствам ChemSynthesis. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU. Реферативно- библиографические базы данных ВИНИТИ по естественным наукам. Информационно- поисковая система Федерального института промышленной собственности.	4	8		10	ПК-1	ПК-5.В.19.1
6.	Кристаллографические данные минералов (база данным MINCRYST) Института экспериментальной минералогии РАН. Банк данных РАДЭН. База "Термические константы веществ" Объединенного института высоких температур РАН. Баз данных кристаллических структур веществ и материалов Crystallography Open Database. База данных по токсикологии и опасным химическим соединениям TOXNET.	6	12		12	ПК-2	ПК-5.В.19.1

#### 4.2. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
----------------------------	---	----------------------	------------------------

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1.	Типы химических баз данных. Базы данных научной литературы. Кристаллографические базы данных. Базы данных спектров ЯМР. Базы данных химических реакций. Теплофизические базы данных.	6	ПЛ
2.	Структура химических баз данных. Основные дескрипторы поиска. Использование трехмерных моделей молекул для поиска.	4	КтСм
3.	Мерк индекс. Справочник по органической химии Бейльштейна. Химическая реферативная служба (ChemicalAbstractsService). База данных химических соединений и смесей королевского химического общества Великобритании ChemSpider. База данных лекарственных веществ DrugBank. База данных химических соединений и смесей Национального центра биотехнологической информации США PubChem. Регистр токсических эффектов химических соединений (RTECS).	6	ПЛ
4.	Программы для выполнения квантово-химических расчетов. Программа ПРИРОДА. Программа GAUSSIAN. Квантово-химический пакет «ORCA».	4	ПЛ
5.	База данных NIST ChemistryWebBook. База данных Национальной медицинской библиотеки США ChemIDplus. База данных по синтезу химических веществ и физическим свойствам ChemSynthesis. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU. Реферативно-библиографические базы данных ВИНТИ по естественным наукам. Информационно-поисковая система Федерального института промышленной собственности.	4	ЛВ
6.	Кристаллографические данные минералов (база данным MINCRYST) Института экспериментальной минералогии РАН. Банк данных РАДЭН. База "Термические константы веществ" Объединенного института высоких температур РАН. Баз данных кристаллических структур веществ и материалов Crystallography Open Database. База данных по токсикологии и опасным химическим соединениям TOXNET.	6	МК

### 4.3. Занятия семинарского типа.

#### 4.3.1. Семинары, практические занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	Типы химических баз данных. Базы данных научной литературы. Кристаллографические базы данных. Базы данных спектров ЯМР. Базы данных химических реакций. Теплофизические базы данных.	12	МГ
2	Структура химических баз данных. Основные дескрипторы поиска. Использование трехмерных моделей молекул для поиска.	8	МГ
3	Мерк индекс. Справочник по органической химии Бейльштейна. Химическая реферативная служба (ChemicalAbstractsService). База данных химических соединений и смесей королевского химического общества Великобритании ChemSpider. База данных лекарственных веществ DrugBank. База данных химических соединений и смесей Национального центра биотехнологической информации США PubChem. Регистр токсических эффектов химических соединений (RTECS).	12	КтСм
4	Программы для выполнения квантово-химических расчетов. Программа ПРИРОДА. Программа GAUSSIAN. Квантово-химический пакет «ORCA»	8	КтСм
5	База данных NIST ChemistryWebBook. База данных Национальной медицинской библиотеки США ChemIDplus. База данных по синтезу химических веществ и физическим свойствам ChemSynthesis. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU. Реферативно-библиографические базы данных ВИНТИ по естественным наукам. Информационно-поисковая система Федерального института промышленной собственности.	8	МГ
6	Кристаллографические данные минералов (база данным MINCRYST) Института экспериментальной минералогии РАН. Банк данных РАДЭН. База "Термические константы веществ" Объединенного института высоких температур РАН. Баз данных кристаллических структур веществ и материалов Crystallography Open Database. База данных по токсикологии и опасным химическим соединениям TOXNET.	12	КтСм

### 4.3.2. Занятия лабораторного типа.

Не предусмотрены

### 4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	Типы химических баз данных. Базы данных научной литературы. Кристаллографические базы данных. Базы данных спектров ЯМР. Базы данных химических реакций. Теплофизические базы данных.	8	Устный опрос
2	Структура химических баз данных. Основные дескрипторы поиска. Использование трехмерных моделей молекул для поиска.	8	Устный опрос
3	Мерк индекс. Справочник по органической химии Бейльштейна. Химическая реферативная служба (ChemicalAbstractsService). База данных химических соединений и смесей королевского химического общества Великобритании ChemSpider. База данных лекарственных веществ DrugBank. База данных химических соединений и смесей Национального центра биотехнологической информации США PubChem. Регистр токсических эффектов химических соединений (RTECS).	8	Устный опрос
4	Программы для выполнения квантово-химических расчетов. Программа ПРИРОДА. Программа GAUSSIAN. Квантово-химический пакет «ORCA»	8	Устный опрос
5	База данных NIST ChemistryWebBook. База данных Национальной медицинской библиотеки США ChemIDplus. База данных по синтезу химических веществ и физическим свойствам ChemSynthesis. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU. Реферативно-библиографические базы данных ВИНТИ по естественным наукам. Информационно-поисковая система Федерального института промышленной собственности.	10	Устный опрос

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
6	Кристаллографические данные минералов (база данным MINCRYST) Института экспериментальной минералогии РАН. Банк данных РАДЭН. База "Термические константы веществ" Объединенного института высоких температур РАН. Баз данных кристаллических структур веществ и материалов Crystallography Open Database. База данных по токсикологии и опасным химическим соединениям TOXNET.	12	Устный опрос

#### 4.5. Темы сообщений студентов на семинарских занятиях.

1. Химический справочник Мерк индекс.
2. Справочник по органической химии Бейльштейна.
3. Химическая реферативная служба (ChemicalAbstractsService).
4. База данных химических соединений и смесей королевского химического общества Великобритании ChemSpider.
5. База данных лекарственных веществ DrugBank.
6. База данных химических соединений и смесей Национального центра биотехнологической информации США PubChem.
7. Регистр токсических эффектов химических соединений (RTECS).
8. Программы для выполнения квантово-химических расчетов.
9. Квантово-химический пакет ПРИРОДА.
10. Квантово-химический пакет GAUSSIAN.
11. Квантово-химический пакет «ORCA».
12. База данных NIST ChemistryWebBook.
13. База данных Национальной медицинской библиотеки США ChemIDplus.
14. База данных по синтезу химических веществ и физическим свойствам ChemSynthesis.
15. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU.
16. Реферативно-библиографические базы данных ВИНТИ по естественным наукам.
17. Информационно-поисковая система Федерального института промышленной собственности.
18. Кристаллографические данные минералов (база данным MINCRYST) Института экспериментальной минералогии РАН.
19. Банк данных РАДЭН.
20. База "Термические константы веществ" Объединенного института высоких температур РАН.
21. Баз данных кристаллических структур веществ и материалов Crystallography Open Database.
22. База данных по токсикологии и опасным химическим соединениям TOXNET.

## **5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.**

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте: <http://media.technolog.edu.ru>

## **6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации**

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета.

Зачет предусматривают выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуются вопросами (заданиями) двух теоретических вопросов.

При сдаче зачета, студент получает два вопроса из перечня вопросов, время подготовки студента к устному ответу - до 30 мин.

Пример варианта вопросов на зачете:

### **Вариант № 1**

1. База данных химических соединений и смесей королевского химического общества Великобритании ChemSpider
2. Кристаллографические данные минералов (база данным MINCRYST) Института экспериментальной минералогии РАН

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1

Результаты освоения дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций достигнут пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе – оценка «зачет».

## **7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины.**

### **а) печатные издания:**

1. Плонский, В. Ю. Проектирование баз данных в СУБД MySQL: Практикум / В. Ю. Плонский, Г. В. Кузнецова; Минобрнауки России, Санкт - Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра систем автоматизированного проектирования и управления. – Санкт-Петербург : [б. и.], 2019. – 53 с.

2. Бутырская, Е. В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и Gauss View / Е. В. Бутырская - Москва: СОЛОН-Пресс, 2011. - 218 с. - ISBN 978-5-91359-095-4.

3. Типовые расчеты по физической и коллоидной химии: учебное пособие / А. Н. Васюкова, О. П. Задачаина, Н. В. Насонова, Л. И. Перепелкина. - Санкт-Петербург; Москва; Краснодар: Лань, 2014. - 138 с. - ISBN 978-5-8114-1605-9.

### **б) электронные учебные издания:**

1. Практикум по информатике : Учебное пособие / Н. М. Андреева, Н. Н. Василюк; Н. И. Пак; Е. К. Хеннер – Санкт-Петербург; Москва; Краснодар : Лань, 2019. - 248 с. - ISBN 978-5-8114-2961-5 // ЛАНЬ : электронно-библиотечная система - URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 25.03.2019). - Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

2. Зубкова, Т. М. Технология разработки программного обеспечения : учебное пособие / Т. М. Зубкова. – Санкт-Петербург; Москва; Краснодар : Лань, 2019. - 324 с. - ISBN 978-5-8114-3842-6 // ЛАНЬ : электронно-библиотечная система - URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 25.03.2019). - Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

3. Остроух, А. В. Интеллектуальные информационные системы и технологии : Монография / А. В. Остроух, А. Б. Николаев. – Санкт-Петербург; Москва; Краснодар : Лань, 2019. - 308 с. - ISBN 978-5-8114-3409-1 // ЛАНЬ : электронно-библиотечная система - URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 25.03.2019). - Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

4. Волк, В. К. Базы данных. Проектирование, программирование, управление и администрирование : Учебник / В. К. Волк. - Санкт-Петербург : Лань, 2020. - 244 с. - ISBN 978-5-8114-4189-1 // ЛАНЬ : электронно-библиотечная система - URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 25.03.2019). - Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

5. Базы данных : учебное пособие / В. И. Халимон, Г. А. Мамаева, А. Ю. Рогов, В. Н. Чепикова; Минобрнауки России, Санкт - Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра системного анализа и информационных технологий. – Санкт-Петербург : [б. и.], 2017. - 118 с. // СПбГТИ: электронная библиотека - URL: [https:// technolog.bibliotech.ru](https://technolog.bibliotech.ru) - Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

6. Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия : Учебное пособие / В. И. Барановский. – Санкт-Петербург; Москва; Краснодар : Лань, 2019. - 428 с. - ISBN 978-5-8114-3961-4 // ЛАНЬ : электронно-библиотечная система - URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 25.03.2019). - Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

7. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для вузов по химико-технологическим направлениям и спец. / В. Г. Цирельсон. - Москва : Лаборатория знаний, 2017. - 522 с. - ISBN 978-5-00101-502-4 // ЛАНЬ : электронно-библиотечная система - URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 25.03.2019). - Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

8. Гартман, Т. Н. Моделирование химико-технологических процессов. Принципы применения пакетов компьютерной математики : Учебное пособие для вузов по направлению подготовки "Химическая технология" / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. - Санкт-Петербург : Лань, 2020. - 404 с. - ISBN 978-5-8114-3900-3 // ЛАНЬ : электронно-библиотечная система - URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 25.03.2019). - Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

## **8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.**

1. Учебный план, РПД и учебно-методические материалы: <http://media.technolog.edu.ru>

Интернет-ресурсы: проводить поиск в различных системах, таких как [www.yandex.ru](http://www.yandex.ru), [www.google.ru](http://www.google.ru), [www.rambler.ru](http://www.rambler.ru), [www.yahoo.ru](http://www.yahoo.ru) и использовать материалы сайтов, рекомендованных преподавателем на лекционных занятиях.

С компьютеров института открыт доступ к:

[www.elibrary.ru](http://www.elibrary.ru) - eLIBRARY - научная электронная библиотека периодических изданий;

<http://e.lanbook.com> - Электронно-библиотечная система издательства «Лань», коллекции «Химия» (книги издательств «Лань», «Бином», «НОТ»), «Нанотехнологии» (книги издательства «Бином.Лаборатория знаний»);

[www.consultant.ru](http://www.consultant.ru) - КонсультантПлюс - база законодательных документов по РФ и Санкт-Петербургу;

[www.scopus.com](http://www.scopus.com) - База данных рефератов и цитирования Scopus издательства Elsevier;

<http://webofknowledge.com> - Универсальная реферативная база данных научных публикаций WebofScience компании ThomsonReuters;

<http://iopscience.iop.org/journals?type=archive>, <http://iopscience.iop.org/page/subjects> - Издательство IOP (Великобритания);

[www.oxfordjournals.org](http://www.oxfordjournals.org) - Архив научных журналов издательства OxfordUniversityPress;

<http://www.sciencemag.org/> - Полнотекстовый доступ к журналу Science (The American Association for the Advancement of Science (AAAS));

<http://www.nature.com> - Доступ к журналу Nature (Nature Publishing Group);

<http://pubs.acs.org> - Доступ к коллекции журналов Core + издательства AmericanChemicalSociety;

<http://journals.cambridge.org> - Полнотекстовый доступ к коллекции журналов CambridgeUniversityPress.

## **9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.**

Все виды занятий по дисциплине «Химические базы данных» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТП СПбГТИ 040-02. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования;

СТО СПбГТИ 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКВД. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению.

Планирование времени, необходимого на изучение данной дисциплины, лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала.

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:

плановость в организации учебной работы;

серьезное отношение к изучению материала;

постоянный самоконтроль.

На занятия студент должен приходиться, имея знания по уже изученному материалу.

## **10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.**

### **10.1. Информационные технологии.**

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий:

- чтение лекций с использованием слайд-презентаций;
- взаимодействие с обучающимися посредством электронной информационно-образовательной среды университета.

### **10.2. Программное обеспечение.**

Для проведения занятий имеются персональные компьютеры с программным обеспечением:

Windows XP Starter Edition. (Государственный контракт № 24 от 14.09.2007, срок действия – бессрочно),

Microsoft Office (Microsoft Excel): Office 2007 Russian OLP NL AE (Государственный контракт № 24 от 14.09.2007, срок действия – бессрочно), OfficeStd 2013 Rus OLP NL (Контракт № 02(03)15 от 15.01.2015, срок действия -20 лет).

- ИВТАНТЕРМО

### **10.3. Базы данных и информационные справочные системы.**

База термодинамических данных ИВТАНТЕРМО (договор с ОИВТ РАН № Д-2456-19 от 30 августа 2019 г., бессрочно)

- 1) Справочно-поисковая система «Консультант-Плюс»
- 2) Открытая база данных NISTChemistryWebBook режим доступа <http://webbook.nist.gov>
- 3) База данных ИВТАНТЕРМО
- 4) <http://google.com/patent>- база патентов США.
- 5) <http://borovic.ru>- база патентов России.
- 6) <http://prometeus.nse.ru> – база ГПНТБ СО РАН.
- 7) <http://1.fips.ru/wps/portal/Register> - Федеральный институт промышленной собственности
- 8) <http://freepatentsonline.com>- база патентов США.
- 9) <http://patentmatie.com/welcome> - база патентов США.
- 10) [http://patika.ru/Epasenet\\_patentnie\\_poisk.html](http://patika.ru/Epasenet_patentnie_poisk.html) - европейская база патентов.
- 11) <http://gost-load.ru>- база ГОСТов.
- 12) <http://worlddofaut.ru/index.php> - база ГОСТов.
- 13) <http://elibrary.ru> – Российская поисковая система научных публикаций.
- 14) <http://springer.com> – англоязычная поисковая система научных публикаций.
- 15) <http://dissforall.com> – база диссертаций.
- 16) <http://diss.rsl.ru> – база диссертаций.
- 17) <http://webbook.nist.gov/chemistry> - NISTStandardReferenceDatabase.
- 18) <http://riodb.ibase.aist.go.jp/riohomee.html> - база спектров химических соединений.
- 19) Международная мультидисциплинарная аналитическая реферативная база данных научных публикаций WebofScience (режим доступа: <http://apps.webofknowledge.com>, свободный с любого зарегистрированного компьютера института)

20) Международная мультидисциплинарная аналитическая реферативная база данных научных публикаций Scopus (режим доступа: <http://www.scopus.com>, свободный с любого зарегистрированного компьютера Института)

## **11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы.**

Для ведения лекционных и практических занятий используется аудитория, оборудованная средствами оргтехники, на 33 посадочных места.

Материально-техническое обеспечение дисциплины:

доступ к фондам учебных пособий, библиотечным фондам с периодическими изданиями по соответствующим темам, наличие компьютеров, подключенных к сети Интернет и оснащенных средствами медиапрезентаций (медиакоммуникаций); учебный план, РПД и учебно-методические материалы: <http://media.technolog.edu.ru>

## **12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.**

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебные процесс осуществляется в соответствии с Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГТИ(ТУ), утвержденным ректором 28.08.2014.

**Приложение № 1**  
к рабочей программе дисциплины

**Фонд оценочных средств  
для проведения промежуточной аттестации  
по дисциплине "Химические базы данных"**

**1. Перечень компетенций и этапов их формирования.**

<b>Индекс компетенции</b>	<b>Содержание</b>	<b>Этап формирования</b>
<b>ПК-4</b>	<b>Способен применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов</b>	промежуточный
<b>ПК-5</b>	<b>Способен получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий</b>	промежуточный

## 2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	УРОВНИ СФОРМИРОВАННОСТИ (описание выраженности дескрипторов)
			«зачтено»
<b>ПК-4.В.19.1</b> Использование основных естественнонаучных законов для моделирования химического эксперимента	<b>Знает</b> современные программные продукты и базы данных, ориентированные на моделирование химического эксперимента (ЗН-1)	Ответы на вопросы №1 - 17 к зачету	Знает современные программные продукты и базы данных, ориентированные на моделирование химического эксперимента
	<b>Умеет</b> задавать условия проведения вычислительного эксперимента с использованием химических баз данных (У-1)	Ответы на вопросы № 1 -17 к зачету	Умеет задавать условия проведения вычислительного эксперимента с использованием химических баз данных
	<b>Владеет</b> навыками использования программных продуктов для проведения вычислительного химического эксперимента и анализа полученных результатов (Н-1).	Ответы на вопросы № 1-17 к зачету	Владеет навыками использования программных продуктов для проведения вычислительного химического эксперимента и анализа полученных результатов
<b>ПК-5.В.19.1</b> Систематизация результатов научных экспериментов с использованием химических баз данных	<b>Знает</b> классификацию и структуру химических баз данных (ЗН-2)	Ответы на вопросы № 18-31 к зачету	Знает классификацию и структуру химических баз данных
	<b>Умеет</b> планировать и организовывать работу в химических базах данных (У-2)	Ответы на вопросы № 18-31 к зачету	Умеет планировать и организовывать работу в химических базах данных

	<b>Владеет</b> навыками использования химических баз данных для интерпретации результатов научных экспериментов (Н-2)	Ответы на вопросы № 18-31 к зачету	Владеет навыками использования химических баз данных для интерпретации результатов научных экспериментов
--	---	------------------------------------	--

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ (ТУ): промежуточная аттестация проводится в форме **зачета**. Критерии оценивания– «*зачтено*», «*не зачтено*» приведены в таблице 2.

Оценка «зачтено» выставляется, если ответ студента отличается последовательностью, логикой изложения, учащийся демонстрирует глубину владения представленным материалом, ответы формулируются аргументировано, обосновывается собственная позиция в проблемных ситуациях.

Оценка «не зачтено» ставится, если ответ студента не передает содержание проблемы, не демонстрирует умение выделять главное, существенное, ответ носит краткий, неглубокий, поверхностный характер.

**3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации**  
**а) Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-4**

1. Типы химических баз данных.
2. Базы данных научной литературы.
3. Архитектура организации химических баз данных
4. Кристаллографические базы данных.
5. Базы данных спектров ЯМР.
6. Базы данных химических реакций.
7. Теплофизические базы данных.
8. Структура химических баз данных.
9. Основные дескрипторы поиска в химических базах данных.
10. Использование трехмерных моделей молекул для поиска в химических базах данных.
11. Химический справочник Мерк индекс.
12. Справочник по органической химии Бейльштейна.
13. Химическая реферативная служба (ChemicalAbstractsService).
14. База данных химических соединений и смесей королевского химического общества Великобритании ChemSpider.
15. База данных лекарственных веществ DrugBank.
16. База данных химических соединений и смесей Национального центра биотехнологической информации США PubChem.
17. Регистр токсических эффектов химических соединений (RTECS).

**б) Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-5**

18. Программы для выполнения квантово-химических расчетов.
19. Квантово-химический пакет ПРИРОДА.
20. Квантово-химический пакет GAUSSIAN.
21. Квантово-химический пакет «ORCA»
22. База данных NIST ChemistryWebBook.
23. База данных Национальной медицинской библиотеки США ChemIDplus.
24. База данных по синтезу химических веществ и физическим свойствам ChemSynthesis.
25. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU.
26. Реферативно-библиографические базы данных ВИНТИ по естественным наукам. Информационно-поисковая система Федерального института промышленной собственности.
27. Кристаллографические данные минералов (база данным MINCRYST) Института экспериментальной минералогии РАН.
28. Банк данных РАДЭН. База "Термические константы веществ" Объединенного института высоких температур РАН.
29. Баз данных кристаллических структур веществ и материалов Crystallography Open Database.
30. База данных по токсикологии и опасным химическим соединениям TOXNET.
31. Основные результаты квантово-химических расчетов. Визуализация результатов расчета.

К зачету допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. При сдаче зачета, студент получает два вопроса из перечня, приведенного выше.

Время подготовки студента к устному ответу на вопросы - до 30 мин.

**4.Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений и навыков, характеризующих этапы формирования компетенций.**

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СПб ГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКДВ Порядок проведения зачетов и экзаменов.

По дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме зачёта.

При этом «зачёт» соотносится с пороговым уровнем сформированности компетенции.