

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 31.10.2023 16:51:46
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
« 20 » марта 2019 г.

Рабочая программа дисциплины
ПРИКЛАДНАЯ ИНФОРМАТИКА В ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Направление подготовки

09.03.03 Прикладная информатика

Направленность программы бакалавриата

Прикладная информатика в химии

Квалификация

Бакалавр

Форма обучения

Очная

Факультет **химической и биотехнологии**

Кафедра **органической химии**

Б1.В.16.02

Санкт-Петербург

2019

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность разработчика	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
доцент		доцент Ключинский С.А.

Рабочая программа дисциплины «Прикладная информатика в органической химии»
обсуждена на заседании кафедры органической химии
протокол от « 5 » _03___2019 № 8_
Заведующий кафедрой

М.Л. Петров

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химической и биотехнологии
протокол от « 12 » 03 2019 № 8

Председатель

М.В. Рутто

СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления подготовки
“Прикладная информатика”
Директор библиотеки

И.В. Новожилова

Т.Н. Старостенко

Начальник методического отдела
учебно-методического управления
Начальник
учебно-методического управления

Т.И. Богданова

С.Н. Денисенко

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	04
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы.....	06
3. Объем дисциплины	06
4. Содержание дисциплины	
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	06
4.2. Занятия лекционного типа.....	07
4.3. Занятия семинарского типа.....	08
4.3.1. Семинары, практические занятия	08
4.3.2. Лабораторные занятия.....	08
4.4. Самостоятельная работа.....	08
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	09
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	09
7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины	09
8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.....	09
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	09
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	
10.1. Информационные технологии.....	10
10.2. Программное обеспечение.....	10
10.3. Базы данных и информационные справочные системы.....	10
11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы	10
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья	10

Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.

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 ¹	Код и наименование индикатора достижения компетенции ²	Планируемые результаты обучения (дескрипторы) ³
компетенция ПК-12 Способен проводить научно-исследовательские и опытно-конструкторские разработки по отдельным разделам темы	ИДК ПК-12.10 Применение прикладного программного обеспечения для исследований и разработок при решении прикладных задач в области профессиональной деятельности	Знать: системы названий (номенклатуру) органических соединений; основные закономерности химического поведения основных классов органических соединений; виды представлений структуры органических соединений, в том числе и кодирующие, т.е. способные быть использованными для кодирования, хранения, поиска и извлечения информации с помощью компьютера Уметь: осуществлять поиск информации о строении, методах синтеза, физико-химических свойствах, реакционной способности и биологической активности органических соединений Владеть: основными методами и средствами текстового и структурного поиска научно-технической и патентной информации по химии и химической технологии органических веществ; организацией обработки, хранения и управления химической информацией

¹ Содержание и номер компетенции в точности соответствует ФГОС ВО и отображается в матрице компетенций для конкретной дисциплины

² Код индикатора присваивается руководителем направления подготовки, отображается в матрице компетенции и доводится разработчиком РПД. Повторение кодов индикаторов для конкретной компетенции, реализуемой разными дисциплинами, не допускается

³ Дескрипторы переносятся из матрицы компетенций без смены формулировок

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина относится к базовым дисциплинам (Б.1 В.16.02) и изучается на 2 курсе в 3 семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «общая и неорганическая химия», «физика».

Полученные в процессе изучения дисциплины «Прикладная информатика в органической химии» знания, умения и навыки могут быть использованы в научно-исследовательской работе дипломанта и при выполнении выпускной квалификационной работы

3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, ЗЕ/академ. часов
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов)	3/108
Контактная работа с преподавателем:	58
занятия лекционного типа	18
занятия семинарского типа, в т.ч.	36
семинары, практические занятия	36
лабораторные работы	-
курсовое проектирование (КР или КП)	-
КСР	4
другие виды контактной работы	
Самостоятельная работа	50
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)	1 Кр
Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, экзамен)	зачет

4. Содержание дисциплины.

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, академ. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, академ. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы			
1	Введение и классификация органических соединений	2				ПК-12 ПК-12	ПК-12.10 ПК-12.10
2	Углеводороды	4				ПК-12	ПК-12.10
3	Кислородсодержащие углеводороды	2				ПК-12	ПК-12.10
4	Азотсодержащие углеводороды	2					
5	Ароматические углеводороды и их производные	6				ПК-12	ПК-12.10
6	Гетероциклические соединения	2				ПК-12	ПК-12.10
7	Химическая информация. Типы и особенности химической информации		2			ПК-12	ПК-12.10
8	Текстовые базы данных. Google Scholar, Scopus, ScienceDirect, Web of Science		4			ПК-12	ПК-12.10
9	Патентные базы данных		2			ПК-12	ПК-12.10
10	Организация обработки, хранения и управления химической информацией (пакет Mendeley)		1			ПК-12	ПК-12.10
11	Компьютерные представления химических структур. Линейные нотации.		1			ПК-12	ПК-12.10
12	Визуализация пространственной структуры молекул. Химические редакторы ACD/ChemSketch, MarvinSketch, Accelrys Draw, ChemDraw		4			ПК-12 ПК-12	ПК-12.10 ПК-12.10
	Визуализация 3D - структур металлоорганических комплексов						

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, академ. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, академ. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы			
13	Прогнозирование физико-химических свойств химических соединений на основании их строения экспериментально-статистическими методами. Пакеты ACD/Labs Freeware, Marvin. Структура, функции и возможности баз данных Reaxys Кембриджская база структурных данных Cambridge Structural Database (CSD)		4			ПК-12	ПК-12.10
14			2			ПК-12	ПК-12.10
15			4			ПК-12	ПК-12.10
16			2			ПК-12	ПК-12.10

4.2. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, академ. часы	Иновационная форма
1	<u>Введение и классификация органических соединений</u> Предмет органической химии. Развитие теоретических представлений в органической химии. Изомерия и стереохимические представления в органической химии. Природа связей. Типы деформации электронной плотности в молекулах органических веществ. Классификация реакций по результатам и типам разрыва химических связей.	2	Слайд-презентация

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
2	<p><u>Углеводороды.</u> Предельные углеводороды и структурная изомерия. Номенклатура предельных углеводородов. σ-Связи в предельных углеводородах. Методы получения предельных углеводородов. Химические свойства предельных углеводородов. Этиленовые углеводороды. Изомерия: структурная и пространственная (<i>цис-транс</i>-изомерия). Номенклатура. Характер связей в этилене, sp^2-гибридизация. π-Связь. Получение. Химические свойства, полимеризация. Ацетиленовые углеводороды. Изомерия и номенклатура. Природа тройной связи. sp-Гибридизация. Методы получения ацетилена. Химические свойства. Реакции присоединения. Реакции замещения, образование ацетиленидов.</p>	4	Слайд-презентация
3	<p><u>Кислородсодержащие углеводороды</u> Одно- и многоатомные спирты. Изомерия и номенклатура. Способы получения. Химические свойства. Кислотные и основные свойства. Двухатомные спирты или гликоли. Получение. Особенности физических и химических свойств гликолей. Глицерин. Получение, химические свойства. Альдегиды и кетоны. Кето-енольная таутомерия. Получение, химические свойства. Реакции конденсации карбонильных соединений. Одно- и многоосновные карбоновые кислоты и их производные. Изомерия и номенклатура кислот. Методы получения. Химические свойства. Константы кислотности. Образование и реакции производных карбоновых кислот</p>	2	
4	<p><u>Азотсодержащие углеводороды</u> Нитросоединения. Строение нитрогруппы. Изомерия. Получение, физические и химические свойства. Таутомерия нитросоединений. Амины. Первичные, вторичные, третичные амины. Получение аминов. Основность аминов. Солеобразование, алкилирование, ацилирование, реакция с азотистой кислотой. Понятие о диаминах.</p>	2	

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
5	<u>Ароматические углеводороды и их производные</u> Ароматические углеводороды ряда бензола. Правило Хюккеля. Получение бензола, нафталина и их гомологов. Физические и химические свойства бензола и его гомологов. Реакции электрофильного замещения. Галогенопроизводные ароматических углеводородов. Нитросоединения ароматических углеводородов. Сульфокислоты ароматических углеводородов. Ароматические амины. Одно- и многоатомные фенолы, ароматические спирты, хиноны. Ароматические альдегиды, кетоны. Карбоновые кислоты ароматического ряда	6	
6	<u>Гетероциклические соединения</u> Пятичленные и шестичленные гетероциклические соединения, π -избыточные и π -дефицитные гетероциклы, гетероциклические соединения с конденсированными ядрами. Ароматический характер гетероциклов. Пятичленные гетероциклические соединения: фуран, пиррол, тиофен. Влияние гетероатома на ароматические свойства соединения. Ацидофобность пятичленных гетероциклов. Шестичленные гетероциклические соединения Строение пиридина. Химические свойства пиридина: основность пиридина, реакции электрофильного и нуклеофильного замещения в пиридине. Понятие об алкалоидах. Никотин.	2	Слайд-презентация

4.3. Занятия семинарского типа.

4.3.1. Семинары, практические занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
7	<u>Химическая информация. Типы и особенности химической информации.</u> Первичные и вторичные источники химической информации.	2	

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
	Типы публикаций в научных журналах. Структура научной статьи. DOI. Рефераты. Реферативные журналы и базы данных. Справочники и энциклопедии. Сборник «Organic Synthesis», некоммерческая химическая база данных ChemSpider, портал Organic Chemistry Portal		
8	<u>Текстовые базы данных. Google Scholar, Scopus, Science Direct, Web of Science.</u> Классификация баз данных по типу содержимого. Структура базы данных. Синтаксис запроса в текстовых базах данных. Сравнение поисковых систем Google и Google Scholar. Структура и возможности реферативной базы Scopus. Принципы формулировки поисковой задачи. Полнотекстовая база научной периодики Science Direct. Знакомство с мультидисциплинарной реферативной базой Web of Science и ИПС SciFinder. Возможности этих информационных систем. Ресурсы и базы данных ВИНТИ по химии и химической технологии.	4	
9	<u>Патентные базы данных.</u> Патент как юридический документ. Требования к патенту. Структура патентного документа. База патентов USPTO (US Patent and Trademark Office). Строение, правила поискового запроса и использование. Поисковая патентная система Espacenet (European Patent Office), её структура и функционирование. Патентное ведомство России – Роспатент.	2	
10	<u>Организация обработки, хранения и управления химической информацией.</u> Mendeley - бесплатная программа для управления библиографической информацией и персональной научной библиотекой. Интеграция со Scopus и ScienceDirect. Создание своего профиля в Mendeley. Знакомство EndNote — коммерческая система управления библиографической информацией.	1	

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
11	<u>Компьютерные представления химических структур. Линейные нотации.</u> Различные представления (описания) органической молекулы. Кодированные представления: линейные представления SMILES и InChI; представления в виде молекулярных графов.	1	
12	<u>Визуализация пространственной структуры молекул. Химические редакторы ACD/ChemSketch, MarvinSketch, Accelrys Draw, ChemDraw.</u> Внешний вид, строение, инструменты, элементы управления редакторов. Изображение (визуализация) структуры молекул с помощью структурных химических редакторов. Отображение на плоскости молекулярных структур любой сложности, запись уравнения реакции. Сравнение двумерных химических редакторов.	4	
13	<u>Визуализация 3D - структур металлоорганических комплексов.</u> Химический редактор MarvinSketch. Настройка редактора для работы в 3-D пространстве. Выбор многогранника (полиэдра) как основы 3-D изображения комплекса. Алгоритм создания объемной структуры. Построение 3-D образов комплексов различной степени сложности.	4	
14	<u>Прогнозирование физико-химических свойств химических соединений на основании их строения экспериментально-статистическими методами.</u> Пакеты ACD/Labs Freeware, Marvin. Определение расчётных коэффициентов липофильности log P/log D, растворимости в H ₂ O, pKa, значений молекулярных рефракций для ряда органических соединений. Сравнение с экспериментальными значениями. Имитация спектров ЯМР ¹ H и ¹³ C органических веществ. Определение расчётных длин и углов между связями органических соединений.	2	

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
15	<u>Структура, функции и возможности баз данных Reaxys.</u> Определение физико-химических характеристик органических веществ. Обзор методов синтеза заданного соединения. Составления синтез-плана. Рассмотрение данных по реакционной способности данного вещества. Сохранение полученных данных.	4	
16	<u>Кембриджская база структурных данных Cambridge Structural Database (CSD.</u> Программа поиска информации о кристаллическом и молекулярном строении органических и элементоорганических веществ ConQuest (строение, инструменты, элементы управления). Формулировка запроса поиска (текст, структура) Программа Mercury для визуализации результатов поиска. Определение геометрических параметров структуры вещества(длины связей и валентные углы). Сравнение полученных экспериментальных и расчётных(ACD/Labs) данных.	2	
17	Зачет	4	

4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1,2	Получение и химические свойства алканов, алкенов, алкинов.	4	Устный опрос
5	Ароматические соединения, реакции электрофильного замещения	6	Контрольная работа
7,8	Химическая информация. Текстовые базы данных.	4	Устный опрос
9	Патентные базы данных.	4	Проверка дом. зад.
10	Хранения и управления химической информацией (пакет Mendeley)	2	Проверка дом. зад.
11	Компьютерные представления химических структур. Линейные нотации.	4	Проверка дом. зад.
12	Химические редакторы ACD/ChemSketch, MarvinSketch, Accelrys Draw, ChemDraw	6	Проверка дом. зад.
13	3D- структуры металлоорганических комплексов	8	Проверка дом. зад.
14	Прогнозирование физико-химических свойств химических соединений. Пакет ACD и Marvin	2	Проверка дом. зад.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
15	База данных Reaxys	8	Проверка дом. зад
16	Кембриджская база структурных данных	2	Устный опрос

4.5 Тема контрольной работы

1. Предельные углеводороды. Номенклатура. Химические свойства.
2. Этиленовые углеводороды. Строение. Номенклатура. Химические свойства.
3. Ацетиленовые соединения. Номенклатура. Химические свойства.
4. Спирты. Получение и химические свойства.
5. Альдегиды и кетоны. Особенности строения, изомерии и номенклатура. Получение и химические свойства альдегидов, кетонов.
6. Карбоновые кислоты и их производные. Номенклатура. Получение, химические свойств и взаимные переходы.
7. Ароматические углеводороды. Строение бензола. Химические свойства ароматических углеводородов. Правила ориентации. Ароматические соединения с конденсированными ядрами. Нафталин.
8. Ароматические нитросоединения. Химические свойства.
9. Ароматические сульфокислоты. Свойства.
10. Фенолы, нафтолы. Способы получения и химические свойства. Кислотные свойства фенолов и нафтолов.
11. Ароматические амины. Способы получения и химические свойства. Основность аминов.
12. Ароматические карбонильные соединения и карбоновые кислоты.
13. Пяти- и шестичленные ароматические гетероциклы. Номенклатура. Получение, химические свойства

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 Медиа: <http://media.technolog.edu.ru>

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Своевременное выполнение обучающимся мероприятий текущего контроля позволяет превысить (достигнуть) пороговый уровень («удовлетворительно») освоения предусмотренных элементов компетенций.

Результаты дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций превышен (достигнут) пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета.

К сдаче зачета допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля.

Зачет предусматривают выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуются вопросами (заданиями) двух видов:

теоретический вопрос (для проверки знаний) и комплексная задача (для проверки умений и навыков).

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 патентов USPTO (US Patent and Trademark Office). Строение, правила поискового запроса. Визуализация и сохранение результатов поиска.
2. Редактирование структурных химических формул в программе ACD Freeware

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

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1

7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины

а) печатные издания:

- 1) Петров, А.А. Органическая химия / А.А. Петров, Х.В. Бальян., А.Т. Трощенко. - 5-е изд. перераб. и доп. - СПб: Иван Федоров, 2015. – 624 с.
- 2) Денисов В.Я. Органическая химия. Учебник./Денисов В.Я., Мурышкин Д.Л., Чуйкова Т.В. М., Высш. Школа. 2009. – 544 с.
- 3) Ключинский, С.А. Информационные ресурсы по органической химии в Интернете и графические инструменты (редакторы химических структур) для работы с ними/учебное пособие/С.А. Ключинский. – СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2013. – 44с.
- 4) Беляков, А.В. Кембриджская база структурных данных. Практические работы: Методические указания / А.В. Беляков. – СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2004. – 39 с.

б) электронные учебные издания:

- 5) Акимова, Т.И. Органическая химия. Практикум для химиков : учебное пособие / Т.И. Акимова, Л.Н. Дончак, Н.П. Багина. — Санкт-Петербург : Лань, 2020. — 164 с. — ISBN 978-5-8114-4046-7. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/130151> (дата обращения: 05.02.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
- 6) Грандберг, И.И. Органическая химия : учебник / И.И. Грандберг, Н.Л. Нам. — 9-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2019. — 608 с. — ISBN 978-5-8114-3901-0. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/121460> (дата обращения: 05.02.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
- 7) Кудинов, Ю.И. Основы современной информатики : учебное пособие / Ю.И. Кудинов, Ф.Ф. Пашенко. — 5-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2018. — 256 с. — ISBN 978-5-8114-0918-1. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/107061> (дата обращения: 05.02.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
- 8) Потапов, В.М. Органическая химия : учебник / В.М. Потапов, С.Н. Татаринчик. — 5-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2019. — 504 с. — ISBN 978-5-8114-3978-2. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/125700> (дата обращения: 05.02.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
- 9) Практикум по органической химии : учебное пособие / В.И. Теренин, М.В. Ливанцов, Л.И. Ливанцова, Е.Д. Матвеева. — 3-е изд. — Москва : Лаборатория знаний,

2015. — 571 с. — ISBN 978-5-9963-2615-0. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/84123> (дата обращения: 05.02.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

10) Щеголев, А.Е. Органическая химия. Механизмы реакций : учебное пособие / А.Е. Щеголев, Н.М. Чернов. — Санкт-Петербург : Лань, 2019. — 132 с. — ISBN 978-5-8114-3485-5. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/113383> (дата обращения: 05.02.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

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

1. учебный план, РПД и учебно-методические материалы:

<http://media.technolog.edu.ru>

2. общие поисковые системы: www.google.ru,

3. специальные поисковые системы, сайт МГУ им. Ломоносова:

<http://www.chem.msu.su/rus/elibrary/>,

4. учебные и методические интерактивные программные средства для самостоятельных занятий (домашних работ) студентов размещены в интернете на домашней странице кафедры по адресу: <http://www1.lti-gti.ru/orgchem/> электронно-библиотечные системы:

«Электронный читальный зал – БиблиоТех» <https://technolog.bibliotech.ru/>;

«Лань» <https://e.lanbook.com/books/>.

5. Рагойша, А. А. Текстовый поиск научной химической информации в Интернете. Минск: БГУ, 2012г

<http://elsevierscience.ru/products/scopus/> (информация о реферативной базе данных Scopus)

<http://www.chemaxon.com/products/marvin/> (информация о хим. редакторе MarvinSketch)

<http://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/> (информация о хим. редакторе ACDChemSketch)

http://elsevierscience.ru/files/pdf/Reaxys_QSG.pdf/ Руководство по базовым функциям Reaxys на русском языке

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Все виды занятий по дисциплине проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТО СПбГТИ 020-2011. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лабораторные занятия. Общие требования к организации и проведению.

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 УКДВ. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 016-2015. КС УКДВ. Порядок проведения зачетов и экзаменов.

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 приходить, имея багаж знаний и вопросов 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;
построение и визуализация структур органических молекул,
поиск научной информации по органическим соединениям,
моделирование физико-химических и спектральных свойств органических соединений.

взаимодействие с обучающимися посредством ЭИОС.

10.2. Программное обеспечение.

Windows 7 Enterprise

Microsoft Office (Microsoft Excel)

MarvinSketch 18.24.0 (химический редактор, лицензия ChemAxone 10.2018)

ACDLabs201811

Cambridge Structural Database System (CSD System)

10.3. Базы данных и информационные справочные системы.

Справочно-поисковая система Бельштейн, химического факультета Московского Государственного университета

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

Для ведения лекционных и практических занятий используется ноутбук Toshiba L40, мультимедийный проектор Benq MP 511+, экран. Компьютерный класс 50кв.м., оборудованный персональными компьютерами, объединенными в сеть ПК 8 шт.

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.

**Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по
дисциплине «Прикладная информатика в органической химии»**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Индекс компетенции	Содержание ⁴	Этап формирования ⁵
ПК-12	Способен проводить научно-исследовательские и опытно-конструкторские разработки по отдельным разделам темы	промежуточный

⁴ **Жирным шрифтом** выделяется та часть компетенции, которая формируется в ходе изучения данной дисциплины (если компетенция осваивается полностью, то фрагменты не выделяются).

⁵ Этап формирования компетенции выбирается по п. 2 РПД и учебному плану (начальный – если нет предшествующих дисциплин, итоговый – если нет последующих дисциплин (или компетенция не формируется в ходе практики или ГИА), промежуточный - все другие)

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)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
ПК-12.10 Применение прикладного программного обеспечения для исследований и разработок при решении прикладных задач в области профессиональной деятельности	Знает основные классы органических соединений, основные химические свойства, их взаимные превращения. Знает программные комплексы по визуализации структур молекул. Знает методы текстового и структурного поиска химической информации.	Правильные ответы на вопросы № 1-39 к зачету	Перечисляет не все химические свойства основных классов органических соединений с ошибками Перечисляет некоторые программные комплексы по визуализации структур молекул, но с ошибками. Знает <i>некоторые</i> электронные базы данных, источники справочной и монографической литературы в области органической химии с ошибками	Перечисляет все химические свойства основных классов органических соединений, но с ошибками. Перечисляет все программные комплексы по визуализации структур молекул, но с небольшими ошибками. Знает электронные базы данных, источники справочной и монографической литературы в области органической химии, но с ошибками	Перечисляет все химические свойства основных классов органических соединений без ошибок и знает механизмы реакций. Перечисляет все программные комплексы по визуализации структур молекул. Знает электронные базы данных, источники справочной и монографической литературы в области органической химии

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
	Умеет оценивать свойства химического объекта исследования, умеет выбирать наиболее эффективные пути поиска химической информации и оптимальные программные комплексы для решения поставленной задачи	Правильные ответы на вопросы № 1-39 к зачету	Умеет приблизительно оценивать некоторые свойства химического объекта исследования, выбирать пути поиска химической информации и программные комплексы для решения поставленной задачи с ошибками	Умеет оценивать свойства химического объекта исследования, выбирать пути поиска химической информации и программные комплексы для решения поставленной задачи с помощью наводящих вопросов	Умеет самостоятельно оценивать свойства химического объекта исследования, умеет выбирать наиболее эффективные пути поиска химической информации и оптимальные программные комплексы для решения поставленной задачи.
	Владеет способностью оценивать свойства химического объекта исследования, владеет способностью выбирать наиболее эффективные пути поиска химической информации и оптимальные программные комплексы для решения поставленной задачи		Правильные ответы на вопросы № 1-39 к зачету	С ошибками оценивает свойства химического объекта исследования, выбирает пути поиска химической информации и программные комплексы для решения поставленной задачи	Показывает способность оценивать свойства химического объекта исследования, владеет выбором путей поиска химической информации и программных комплексов для решения поставленной задачи с небольшими подсказками преподавателя

3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации

1. Структурная и пространственная (стерео) изомерия. Привести примеры изомеров из различных классов органических соединений.
2. Получение, особенности строения и химические свойства алканов.
3. Этиленовые углеводороды. Получение, химические свойства и практическое применение.
4. Химические свойства ацетиленовых углеводородов. Реакции замещения, присоединения.
5. Химические свойства одноатомных спиртов.
6. Особенности строения, изомерии и химические свойства альдегидов и кетонов..
7. Предельные одноосновные кислоты и их производные. Получение, химические свойства, применение.
8. Нитросоединения. Строение. Нитро-аци- таутомерия. Химические свойства.
9. Амины, способы получения, Электронное строение, основность.
10. Бензол и его ближайшие гомологи. Получение и химические свойства. Промышленное использование.
11. Получение и химические свойства нитросоединений ароматического ряда.
12. Ароматические сульфокислоты и их производные.
13. Ароматические амины. Получение, строение и химические свойства.
14. Одноатомные фенолы и нафтолы. Получение и химические свойства.
15. Способы получения и химические свойства ароматических альдегидов.
16. Ароматические кетоны. Получение и химические свойства.
17. Одноосновные ароматические кислоты. Получение и химические свойства.
18. Пятичленные гетероциклические соединения с одним гетероатомом. Строение, взаимные переходы. Примеры реакций электрофильного замещения (галогенирование, сульфирование, нитрование).
19. Пиридин. Строение и химические свойства.
20. Изображение структуры молекул с помощью структурных химических редакторов.
21. Двумерные химические редакторы.
22. Преобразование двумерной структуры в трехмерные модели.
23. . Запись уравнения реакции с помощью структурного химического редактора.
24. Структура и название химических соединений.
25. . Редактирование структурных химических формул в программе Accelrys Draw.
26. Химические структурные редакторы для операционных систем Windows.
27. Химический редактор MarvinSketch.
28. Редактирование структурных химических формул молекулы с использованием пакета программ Accelrys Draw
29. Визуализация структуры молекулы с использованием пакета программ Marvin
30. Пакет программ ACD/Lab, ACD/FreeWare
31. Химическая информация.
32. Типы и закономерности химической информации.
33. Базы данных химической информации.
34. Информационная научная база данных по органическим соединениям Beilstein.
35. Информационная научная база данных по неорганическим и металлоорганическим соединениям Gmelin Database.
36. Информационная научная база данных по органическим соединениям on line Интернет программа Reaxys (Elsevier).

37. Прогнозирование физико-химических свойств химических соединений на основании их строения экспериментально-статистическими методами ACD/Lab.
38. Прогнозирование биологических свойств соединений на основании их строения экспериментально-статистическими методами.
39. Исследование структуры и реакционной способности молекул методами компьютерной химии.

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.