

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович  
Должность: Проректор по учебной и методической работе  
Дата подписания: 11.09.2023 12:57:12  
Уникальный программный ключ:  
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
(технический университет)»

УТВЕРЖДАЮ  
Врио проректора по учебной  
и методической работе  
\_\_\_\_\_ Б.В. Пекаревский  
«22» апреля 2021 г.

Рабочая программа дисциплины  
**«Основы химической информатики»**

Направление подготовки  
**18.04.01 Химическая технология**

Направленности программы подготовки

**Химическая технология продуктов тонкого органического синтеза**  
**Химическая технология синтетических биологически активных веществ**

Квалификация  
**Магистр**

Форма обучения  
**очная**

Факультет **химической и биотехнологии**  
Кафедра **химической технологии органических красителей и фототропных соединений**

Санкт-Петербург  
2021

## ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Зав. кафедрой		Рамш С.М.

Рабочая программа дисциплины «Основы химической информатики» обсуждена на заседании кафедры химической технологии органических красителей и фототропных соединений  
протокол от «01» апреля 2021 г. № 4

Заведующий кафедрой

С.М. Рамш

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химической и биотехнологии  
протокол от «20» апреля 2021 г. № 9

Председатель

М.В. Рутто

## СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления		М.В. Рутто
Директор библиотеки		Т.Н. Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		Т.И. Богданова
Начальник УМУ		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 .....	6
3	Объем дисциплины.....	6
4	Содержание дисциплины.....	7
4.1	Разделы дисциплины и виды занятий.....	7
4.2	Занятия лекционного типа .....	10
4.3	Занятия семинарского типа.....	11
4.3.1	Семинары, практические занятия .....	11
4.4	Самостоятельная работа обучающихся .....	14
4.4.1	Вопросы для КСР и самостоятельного изучения .....	15
4.4.2	Темы контрольных работ .....	18
4.4.3	Блоки вопросов к коллоквиуму .....	18
5	Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине .....	19
6	Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации .....	19
7	Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины .....	22
8	Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.....	22
8.1	Интернет-ресурсы общего характера: .....	22
8.2	Интернет-ресурсы по химии и химической технологии: .....	22
9	Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	29
10	Перечень информационных технологий и программного обеспечения, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.....	34
10.1	Информационные технологии.....	34
10.2	Программное обеспечение.....	35
10.3	Базы данных и информационные справочные системы. ....	35
11	Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине .....	36
12	Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья. ....	38
	Приложение № 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации по дисциплине «Основы химической информатики» .....	39
1	Перечень компетенций и этапов их формирования.....	39
2	Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания.....	40
3	Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации .....	44
4	Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.....	45

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

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

Код и наименование компетенции <sup>1</sup>	Код и наименование индикатора достижения компетенции <sup>2</sup>	Планируемые результаты обучения (дескрипторы) <sup>3</sup>
<p><b>ПК-1</b> для направленности 01 Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок при исследовании методов синтеза и свойств продуктов тонкого органического синтеза, органических красителей и фототропных соединений</p> <p><b>ПК-6</b> для направленности 02</p>	<p><b>ПК-1.1</b> для направленности 01 Проведение работ по поиску научно-технической информации и результатов исследований</p> <p><b>ПК-6.1</b> для направленности 02</p>	<p><b>Знать:</b> традиционные источники и способы получения информации по химии и химической технологии (ЗН-1).</p> <p><b>Уметь:</b> использовать традиционные информационные технологии для получения научно-технической информации, необходимой для целей профессиональной деятельности (У-1).</p> <p><b>Владеть:</b> навыками рутинного поиска информации по химии и химической технологии с помощью традиционных библиотечных поисковых систем и технологий (с использованием печатной учебной и научно-технической (энциклопедии, справочники, монографии, периодические издания, патенты) литературы по химии и химической технологии) (Н-1).</p>

<sup>1</sup> Содержание и номер компетенции в точности соответствует ФГОС ВО и отображается в матрице компетенций для конкретной дисциплины.

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

<sup>3</sup> Дескрипторы переносятся из матрицы компетенций без смены формулировок.

Код и наименование компетенции <sup>1</sup>	Код и наименование индикатора достижения компетенции <sup>2</sup>	Планируемые результаты обучения (дескрипторы) <sup>3</sup>
<p><b>ПК-5</b> для направленности 01 Организация аналитического контроля этапов разработки продуктов тонкого органического синтеза с заданными свойствами</p> <p><b>ПК-7</b> для направленности 02</p>	<p><b>ПК-5.5</b> для направленности 01 Организация поиска научно-технической информации о продуктах тонкого органического синтеза</p> <p><b>ПК-7.1</b> для направленности 02</p>	<p><b>Знать:</b> современные источники и способы получения информации по химии и химической технологии (ЗН-2).</p> <p><b>Уметь:</b> использовать современные телекоммуникационные (удаленного доступа, сетевые) информационные технологии для получения научно-технической информации, необходимой для целей профессиональной деятельности (У-2).</p> <p><b>Владеть:</b> навыками рационального поиска информации по химии и химической технологии с помощью современных устройств (девайсов, гаджетов) мобильной связи, хранения, обработки и представления данных (персональных компьютеров (ПК), планшетов, смартфонов и т. п.) и современных поисковых инструментов (машин), базирующихся на информационных технологиях удаленного доступа к специализированным мировым информационным ресурсам в сети Интернет (телекоммуникационные технологии, сетевые информационные технологии), а также на новейших библиотечных информационных технологиях, использующих соответствующее программное обеспечение и источники информации на электронных носителях (Н-2).</p>

## 2 Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина Б1.В.04/Б1.В.05 «Основы химической информатики» принадлежит к числу дисциплин части В, формируемой участниками образовательных отношений, блока Б1 ООП магистратуры по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология. Изучается на 1 семестре I курса магистратуры.

Дисциплина базируется на следующих дисциплинах учебного плана ООП бакалавриата по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология, направленность «Химическая технология органических веществ»:

Введение в информационные технологии,  
Введение в химическую технологию и основы научных исследований.

Дисциплина Б1.В.04/Б1.В.05 «Основы химической информатики» рассматривается как связующее звено между всеми профессиональными дисциплинами основных образовательных программ подготовки бакалавров и магистров – с одной стороны, и выпускной квалификационной работой (ВКР) магистра – с другой.

Полученные в рамках изучения данной дисциплины знания, умения и навыки будут необходимы студентам при подготовке, выполнении и защите выпускной квалификационной работы (ВКР), при решении научно-исследовательских, проектно-конструкторских и производственно-технологических задач в будущей профессиональной деятельности.

## 3 Объем дисциплины

Вид учебной работы	Всего, академических часов
	Очная форма обучения
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b> (зачетных единиц/ академических часов)	<b>6 / 216</b>
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>76</b>
занятия лекционного типа	18
занятия семинарского типа, в том числе	48
семинары, практические занятия (в том числе практическая подготовка)*	48 (12)
лабораторные работы (в том числе практическая подготовка)*	-
курсовое проектирование (КР или КП)	-
КСР	10
другие виды контактной работы	-
<b>Самостоятельная работа</b>	<b>113</b>
<b>Форма текущего контроля</b> (Кр, реферат, РГР, эссе)	<b>Кр-1÷Кр-4</b>
<b>Форма промежуточной аттестации</b> (КР, КП, зачет, экзамен)	<b>Экзамен / 27</b>

\* практическая подготовка только для дисциплин с ПК

## 4 Содержание дисциплины

### 4.1 Разделы дисциплины и виды занятий

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 зачетных единиц трудоемкости, 216 академических час., из них контактные занятия – 76 час., в том числе: лекции – 18 час., практические занятия – 48 час., КСР – 10 час.; СРС – 113 час., экзамен – 27 час.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, акад. часы	Занятия семинарского типа, акад. часы		Контролируемая самостоятельная работа, акад. часы	Самостоятельная работа, акад. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы				
1	Источники научно-технической и патентной информации по химии и химической технологии	4				4	ПК-1 ПК-6	ПК-1.1 ПК-6.1
2	Системы научно-технической информации по химии и химической технологии		3			4	ПК-1 ПК-6	ПК-1.1 ПК-6.1
3	Информационные ресурсы крупнейших публичных и университетских научно-технических библиотек (в том числе электронные) по химии и химической технологии		3			4	ПК-1 ПК-6	ПК-1.1 ПК-6.1
4	Ресурсы фундаментальной библиотеки СПбГТИ (ТУ)		3		10	6	ПК-1 ПК-6	ПК-1.1 ПК-6.1
5	Электронные справочно-информационные базы данных и знаний по химии и химической технологии, а также по смежным дисциплинам		3			4	ПК-1 ПК-6	ПК-1.1 ПК-6.1
6	Структура, функции и возможности баз данных Chemical Abstracts Service (CAS): REGISTRY, CAPLUS, CASREACT, CHEMLIST, CHEMCATS и др. Поисковый инструмент (поисковая машина) SciFinder	5				6	ПК-1 ПК-6	ПК-1.1 ПК-6.1
7	Информационные online продукты Elsevier B.V. Структура, функции и	5				6	ПК-1 ПК-6	ПК-1.1 ПК-6.1

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, академ. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Контролируемая самостоятельная работа, академ. часы	Самостоятельная работа, академ. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы				
	<p>возможности баз данных Reaxys (Beilstein, Gmelin, поисковый инструмент (машина) Reaxys Chemistry Discovery Engine).</p> <p>Полнотекстовая база данных Science Direct. Российская научная электронная библиотека eLIBRARY.RU, Российский индекс научного цитирования (РИНЦ). Библиографическая база данных Scopus.</p> <p>Информационные ресурсы Clarivate Analytics. Платформы баз данных Web of Knowledge и Web of Science. Программа для работы со ссылками EndNote online.</p> <p>Идентификатор ученого ResearcherID</p>							
8	Структура, функции и возможности сетевой системы баз данных STN International – поисково-аналитического инструмента для науки и образования	4				6	ПК-1 ПК-6	ПК-1.1 ПК-6.1
9	Ресурсы и базы данных ВИНТИ по химии и химической технологии		3			4	ПК-1 ПК-6	ПК-1.1 ПК-6.1
10	Патентные базы данных: Роспатент, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office		3			5	ПК-1 ПК-6	ПК-1.1 ПК-6.1
11	Базы данных MEDLINE (National Library of Medicine, US). База по биологической активности химических соединений PubChem (NSBI, National Library of Medicine, US). Кембриджская база		3			4	ПК-1 ПК-6	ПК-1.1 ПК-6.1



№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, акад. часы	Занятия семинарского типа, акад. часы		Контролируемая самостоятельная работа, акад. часы	Самостоятельная работа, акад. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы				
	структурных данных Cambridge Structural Database (CSD) как компонент Cambridge Structural Database System (CSD System) (Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC), UK). Коммерческая база eMolecules (eMolecules Inc.)							
12	Традиционные (рутинные) информационные технологии. Рациональный поиск информации по химии и химической технологии на традиционных (бумажных) носителях		3			6	ПК-5 ПК-7	ПК-5.5 ПК-7.1
13	Современные (передовые) информационные технологии. Методологические основы поиска научно-технической информации по химии и химической технологии с помощью информационных технологий удаленного доступа (сетевых телекоммуникационных технологий) – с помощью сети Интернет и локальных сетей		3			6	ПК-5 ПК-7	ПК-5.5 ПК-7.1
14	Поиск информации по химии и химической технологии в электронных базах данных CAS		6			11	ПК-5 ПК-7	ПК-5.5 ПК-7.1
15	Поиск информации по химии и химической технологии в электронных базах данных Reaxys		6			11	ПК-5 ПК-7	ПК-5.5 ПК-7.1
16	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных сетевой системы STN International, электронной библиотеки eLIBRARY.RU,		3			11	ПК-5 ПК-7	ПК-5.5 ПК-7.1

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, акад. часы	Занятия семинарского типа, акад. часы		Контролируемая самостоятельная работа, акад. часы	Самостоятельная работа, акад. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы				
	библиографических базах Scopus (Elsevier) и Web of Science (Clarivate Analytics)							
17	Поиск патентной информации (патентный поиск) в базах данных Роспатента, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office. Поиск структурной информации в базах данных CSD		3			9	ПК-5 ПК-7	ПК-5.5 ПК-7.1
18	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных ВИНТИ		3			6	ПК-5 ПК-7	ПК-5.5 ПК-7.1
	Экзамен (27)							
	<b>Всего</b>	<b>18</b>	<b>48</b>		<b>10</b>	<b>113</b>		

#### 4.2. Занятия лекционного типа

Количество лекционных часов – 18.

Темы лекций набраны курсивом.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	<i>Источники научно-технической и патентной информации по химии и химической технологии.</i> Современные информационные технологии как совокупность программных и технических средств поиска, сбора, хранения и обработки (систематизации и анализа) информации. Методы, преимущества и недостатки поиска химической информации с использованием традиционных и коммуникационных (сетевых) информационных технологий.	4	ПЛ
6	<i>Структура, функции и возможности баз данных Chemical Abstracts Service (CAS): REGISTRY, CAPLUS, CASREACT, CHEMLIST, CHEMCATS, CAOLD и др. Поисковый инструмент (машина) SciFinder.</i>	5	Л, ЛВ

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
	Информационная служба Chemical Abstracts Service (CAS). Система регистрации химических соединений в CAS. Информационная система CAS ONLINE.		
7	<i>Информационные online продукты Elsevier B.V. Структура, функции и возможности баз данных Reaxys (Beilstein, Gmelin, поисковая машина Reaxys Chemistry Discovery Engine). Полнотекстовая база данных Science Direct. Библиографическая база данных Scopus. Информационные ресурсы Clarivate Analytics. Платформы баз данных Web of Knowledge и Web of Science. Программа для работы со ссылками EndNote online. Идентификатор ученого ResearcherID. Российская научная электронная библиотека eLIBRARY.RU, Российский индекс научного цитирования (РИНЦ).</i>	5	Л, ЛВ
8	<i>Структура и функции сетевой системы баз данных STN International – поисково-аналитический инструмент для науки и образования. Сеть научно-технической информации STN International. Современные технологии обеспечения доступа к базам данных STN International.</i>	4	Л, ЛВ
	<b>Всего:</b>	<b>18</b>	

**Примеры образовательных технологий, способов и методов обучения** (с сокращениями): традиционная лекция (Л), лекция-визуализация (ЛВ), проблемная лекция (ПЛ), лекция – пресс-конференция (ЛПК), занятие – конференция (ЗК), тренинг (Т), дебаты (Д), мозговой штурм (МШ), мастер-класс (МК), «круглый стол» (КрСт), активизация творческой деятельности (АТД), регламентированная дискуссия (РД), дискуссия типа форум (Ф), деловая и ролевая учебная игра (ДИ, РИ), метод малых групп (МГ), занятия с использованием тренажеров, имитаторов (Тр), компьютерная симуляция (КтСм), использование компьютерных обучающих программ (КОП), интерактивных атласов (ИА), посещение врачебных конференции, консилиумов (ВК), участие в научно-практических конференциях (НПК), съездах, симпозиумах (Сим), учебно-исследовательская работа студента (УИРС), проведение предметных олимпиад (О), подготовка письменных аналитических работ (АР), подготовка и защита рефератов (Р), проектная технология (ПТ), экскурсии (Э), дистанционные образовательные технологии (ДОТ).

### 4.3 Занятия семинарского типа

#### 4.3.1 Семинары, практические занятия

Количество часов практических занятий – 48.

Количество контрольных работ – 4.

Практические занятия, проводимые по дисциплине «Основы химической информатики», предназначены для закрепления и углубления знаний, полученных студентами на лекциях, а также для приобретения студентами практических навыков поиска информации по химии и химической технологии в режиме удаленного доступа on line с помощью локальной сети и сети Интернет. Предусмотрено выполнение 4 индивидуальных контрольных заданий (контрольных работ). Задания для информационного поиска формулируются преподавателем, ведущим практические занятия по согласованию с руководителем ООП магистратуры. Как правило, эти задания должны быть увязаны с НИР, выполняемой магистрантом, и темой его будущей ВКР.

Практические занятия проводятся в компьютерном классе. Все ПК подключены к локальной сети института с возможностью выхода в Интернет.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Инновационная форма
		всего	в том числе на практическую подготовку*	
2	Системы научно-технической информации по химии и химической технологии. Специализированные порталы представления научной информации, поисковые системы поиска научной информации по химии и химической технологии	3		АТД, РД
3	Информационные ресурсы крупнейших публичных и университетских научно-технических библиотек (в том числе электронные) по химии и химической технологии. Современные электронные библиотеки. Получение доступа к базам данных и электронным версиям периодических изданий ведущих издательств по химии и химической технологии	3		Э, Т
4	Ресурсы фундаментальной библиотеки СПбГТИ (ТУ). Возможности Фундаментальной библиотеки СПбГТИ (ТУ) по предоставлению доступа к информационным сетям и пользованию электронными библиотеками,	3	3	Э, Т, АР

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Инновационная форма
		всего	в том числе на практическую подготовку*	
	специализированными базами данных по химии и химической технологии <b>Контрольная работа 1</b>			
5	Электронные справочно-информационные базы данных и знаний по химии и химической технологии, а также по смежным дисциплинам	3		АТД, РД
9	Ресурсы и базы данных ВИНТИ по химии и химической технологии	3		АТД, РД
10	Патентные базы данных: Роспатент, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office	3		Т, УИРС
11	Базы данных MEDLINE (National Library of Medicine, US). База по биологической активности химических соединений PubChem (NSBI, National Library of Medicine, US). Кембриджская база структурных данных Cambridge Structural Database (CSD) как компонент Cambridge Structural Database System (CSD System) (Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC), UK). Коммерческая база eMolecules (eMolecules Inc.)	3		АТД, РД, Т
12	Традиционные (рутинные) информационные технологии. Рациональный поиск информации по химии и химической технологии на традиционных (бумажных) носителях	3		Т, УИРС
13	Современные (передовые) информационные технологии. Методологические основы поиска информации по химии и химической технологии с помощью информационных	3		РД, АТД

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Инновационная форма
		всего	в том числе на практическую подготовку*	
	технологий удаленного доступа (сетевых телекоммуникационных технологий) – с помощью сети Интернет и локальных сетей			
14	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных CAS	6	3	Т, УИРС
15	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных Reaxys <b>Контрольная работа 2</b>	6	3	Т, УИРС, АР
16	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных сетевой системы STN International, электронной библиотеки eLIBRARY.RU, библиографических базах Scopus (Elsevier) и Web of Science (Clarivate Analytics) <b>Коллоквиум</b> <b>Контрольная работа 3</b>	3		Т, УИРС, АР
17	Поиск патентной информации (патентный поиск) в базах данных Роспатента, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office. Поиск структурной информации в базах данных CSD <b>Контрольная работа 4</b>	3	3	Т, УИРС, АР
18	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных ВИНТИ	3		Т, УИРС
	<b>Всего</b>	<b>48</b>	<b>12</b>	

#### 4.4 Самостоятельная работа обучающихся

Количество часов самостоятельной работы студентов (СРС) – 113, под контролем преподавателя (КСР) – 10 час.

СРС по дисциплине «Основы химической информатики», направленная на лучшее усвоение, углубление и закрепление студентами знаний, на развитие у них интеллектуальных и практических умений, творческого мышления, приобретение ими

общекультурных и профессиональных компетенций, включает в себя следующие виды работ:

- работа с лекционными материалами;
- изучение разделов дисциплины, вынесенных на самостоятельную проработку, путем самостоятельного поиска, анализа и структурирования учебной информации по соответствующему разделу дисциплины;
- подготовка к практическим занятиям;
- подготовка к коллоквиуму;
- подготовка к контрольным работам;
- выполнение индивидуальных тестовых заданий – информационного поиска по конкретному тематическому запросу (тематический запрос научно-технической информации).

#### 4.4.1 Вопросы для КСР и самостоятельного изучения (СРС)

№ раздела дисциплины	Вопросы для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	Источники научно-технической и патентной информации по химии и химической технологии	4	тематический запрос
2	Системы научно-технической информации по химии и химической технологии	4	тематический запрос
3	Информационные ресурсы крупнейших публичных и университетских научно-технических библиотек (в том числе электронные) по химии и химической технологии	4	тематический запрос
4	Ресурсы фундаментальной библиотеки СПбГТИ (ТУ)	6	тематический запрос
	Подготовка к Кр-1	2 (КСР)	Кр-1
5	Электронные справочно-информационные базы данных и знаний по химии и химической технологии, а также по смежным дисциплинам	4	тематический запрос
6	Структура, функции и возможности баз данных Chemical Abstracts Service (CAS): REGISTRY, CAPLUS, CASREACT, CHEMLIST, CHEMCATS и др. Поисковый инструмент (поисковая машина) SciFinder	6	тематический запрос
7	Информационные online продукты Elsevier B.V. Структура, функции и возможности баз данных Reaxys (Beilstein, Gmelin, поисковый инструмент (машина) Reaxys Chemistry Discovery Engine). Полнотекстовая база данных Science Direct. Российская научная электронная библиотека eLIBRARY.RU, Российский индекс научного цитирования (РИНЦ). Библиографическая база данных Scopus. Информационные ресурсы Clarivate Analytics. Платформы баз данных Web of Knowledge и Web of Science. Программа для работы со	6	тематический запрос

№ раздела дисциплины	Вопросы для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
	ссылками EndNote online. Идентификатор ученого ResearcherID		
8	Структура, функции и возможности сетевой системы баз данных STN International – поисково-аналитического инструмента для науки и образования	6	тематический запрос
9	Ресурсы и базы данных ВИНТИ по химии и химической технологии	4	тематический запрос
10	Патентные базы данных: Роспатент, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office	5	тематический запрос
11	Базы данных MEDLINE (National Library of Medicine, US). База по биологической активности химических соединений PubChem (NSBI, National Library of Medicine, US). Кембриджская база структурных данных Cambridge Structural Database (CSD) как компонент Cambridge Structural Database System (CSD System) (Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC), UK). Коммерческая база eMolecules (eMolecules Inc.)	4	тематический запрос
12	Традиционные (рутинные) информационные технологии. Рациональный поиск информации по химии и химической технологии на традиционных (бумажных) носителях	6	тематический запрос
13	Современные (передовые) информационные технологии. Методологические основы поиска информации по химии и химической технологии с помощью информационных технологий удаленного доступа (сетевых телекоммуникационных технологий) – с помощью сети Интернет и локальных сетей	6	тематический запрос
14	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных CAS	11	тематический запрос
15	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных Reaxys	11	тематический запрос
	Подготовка к Кр-2	4 (КСР)	Кр-2
16	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных сетевой системы STN International, электронной библиотеки eLIBRARY.RU, библиографических базах Scopus, Web of Science. Подготовка к коллоквиуму	11	тематический запрос
	Подготовка к Кр-3	2 (КСР)	Кр-3
17	Поиск патентной информации (патентный поиск) в базах данных Роспатента, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office. Поиск структурной информации в базах данных CSD	9	тематический запрос



№ раздела дисциплины	Вопросы для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
	Подготовка к Кр-4	2 (КСР)	Кр-4
18	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных ВИНТИ	6	тематический запрос
	<i>Итого:</i>	<b>113</b> <b>(КСР – 10)</b>	

Оценка результатов самостоятельной работы организуется как единство двух форм: самоконтроль и контроль со стороны преподавателя.

Самоконтроль зависит от определенных качеств личности, ответственности за результаты своего обучения, заинтересованности в положительной оценке своего труда, материальных и моральных стимулов, от того, насколько обучающийся мотивирован в достижении наилучших результатов. Задача преподавателя состоит в том, чтобы создать условия для самостоятельной работы студента (подготовить ее учебно-методическое обеспечение), привить обучающемуся мотивацию к самостоятельной работе, правильно использовать различные стимулы для выполнения этой работы (система оценок), повышать ее значимость и своевременно осуществлять ее контроль (с помощью фонда оценочных средств).

По учебной дисциплине «Основы химической информатики» предусмотрены следующие виды контроля знаний, умений и навыков студентов со стороны преподавателя: *оперативный контроль успеваемости, текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация.*

*Оперативный контроль успеваемости.* Оперативный контроль осуществляется с целью оценки качества усвоения студентами лекционного и самостоятельно изучаемого материала. Проводится на практических занятиях выборочно в устной форме (собеседование) в ходе изучения очередного раздела учебной дисциплины. При этом используются контрольные вопросы по дисциплине (см. разд. 6; Приложение 1, разд. 3).

*Текущий контроль успеваемости.* Текущий контроль проводится в письменной форме с целью оценки приобретенных студентами на лекционных и практических занятиях, в процессе самостоятельного изучения материала знаний, умений и навыков по данной учебной дисциплине. В течение семестра студенты, руководствуясь РПД, самостоятельно находят ответы на контрольные вопросы по дисциплине (см. разд. 6; Приложение 1, разд. 3) и выполняют контрольные работы по соответствующему разделу учебной дисциплины. Предусмотрено проведение 4 контрольных работ (см. п. 4.4.2). Каждая контрольная работа (Кр) содержит 1 практическое задание по информационному поиску. В качестве теоретической основы практического задания контрольной работы используется один из контрольных вопросов по дисциплине.

По разделу 16 «Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных сетевой системы STN International, электронной библиотеки eLIBRARY.RU, библиографических базах Scopus и Web of Science» перед началом практической работы студент должен сдать коллоквиум. Перечень вопросов к коллоквиуму представлен в п. 4.4.3.

*Промежуточная аттестация.* Для итоговой оценки качества усвоения данной дисциплины, т. е. качества приобретенных знаний, умений, навыков и компетенций, учебным планом предусмотрен *экзамен*. К экзамену допускаются студенты, получившие положительные оценки за выполнение контрольных работ Кр-1÷Кр-4 и сдавшие коллоквиум. На экзамене студенту предлагается ответить на 1 теоретический вопрос и выполнить 1 практическое задание по информационному поиску. В качестве теоретического вопроса экзаменационного билета используется один из контрольных

вопросов по дисциплине (см. разд. 6; Приложение 1, разд. 3). Оценка по экзамену является итоговой по дисциплине и проставляется в приложение к диплому.

#### 4.4.2 Темы контрольных работ

Каждая контрольная работа (Кр) содержит 1 практическое задание (информационный поиск), базирующееся на следующих контрольных вопросах по дисциплине:

##### 4.4.2.1 Тема контрольной работы №1

Ресурсы фундаментальной библиотеки СПбГТИ (ТУ). Поиск информации в электронных ресурсах ФБ с помощью локальной сети.

##### 4.4.2.2 Тема контрольной работы №2

Поиск информации по химии и химической технологии в электронных базах данных Reaxus с помощью сети Интернет в режиме online.

##### 4.4.2.3 Тема контрольной работы №3

Поиск информации по химии и химической технологии в учебных базах данных системы STN International (учебный пакет «STN-Mentor») на электронных носителях (offline), базах данных Российской научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU, библиографических базах Scopus и Web of Science в режиме online.

##### 4.4.2.4 Тема контрольной работы №4

Поиск патентной информации (патентный поиск) в электронных базах данных Роспатента, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office с помощью сети Интернет в режиме online. Поиск структурной информации в базах данных CSD на электронных носителях, а также с помощью сети Интернет в режиме online.

#### 4.4.3 Блоки вопросов к коллоквиуму

по разделу 16 «Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных сетевой системы STN International, электронной библиотеки eLIBRARY.RU, библиографических базах данных Scopus и Web of Science»

1. Организация баз данных STN International. STN как поисково-аналитический инструмент для решения задач науки и образования.
2. Основы поиска информации в базах данных сети STN International.
3. Базы данных LCA и LREGISTRY.
4. Учебные базы данных LMARPAT и LCASREACT.
5. Информация о графических изображениях.
6. Стоимость поиска информации в БД STN International, тарифные планы. Стратегия оптимального поиска информации в БД STN International.
7. Структура Российской научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU. Нахождение Российского индекса научного цитирования (РИНЦ).
8. Методы поиска информации в базах данных Scopus. Нахождение индекса Хирша по данным Scopus.

9. Методы поиска информации в базах данных Web of Science. Нахождение индекса Хирша по данным WoS.

## **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.technology.edu.ru>.

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

Своевременное выполнение обучающимся мероприятий текущего контроля позволяет достигнуть (оценка «удовлетворительно») или превысить пороговый уровень результатов обучения.

Результаты освоения дисциплины считаются достигнутыми, если у обучающегося выявлены индикаторы достижения компетенций, т. е. для всех дескрипторов компетенций достигнут пороговый уровень их усвоения на данном этапе, что соответствует оценке «удовлетворительно».

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме экзамена.

К сдаче экзамена допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля, т. е. получившие положительные оценки за 4 контрольные работы и сдавшие коллоквиум.

Экзамен предусматривает выборочную проверку освоения студентами предусмотренных дескрипторов достижения компетенций. Экзаменационный билет комплектуется вопросами (заданиями) двух видов: теоретический вопрос из перечня контрольных вопросов по дисциплине (см. также п. 3.2 Приложения 1) и практическое задание, заключающееся в поиске информации по конкретному веществу, материалу, устройству, способу получения, свойству и т. п. в базе данных REAXYS или CAS (подбирается преподавателем индивидуально для каждого экзаменуемого по согласованию с руководителем магистерской программы).

Время подготовки студента к устному ответу – до 45 мин.

### **Контрольные вопросы по дисциплине, используемые при текущем контроле успеваемости (в качестве теоретической основы практического задания, содержащегося в контрольной работе) и промежуточной аттестации (теоретические вопросы, содержащиеся в экзаменационных билетах)**

1. Источники научно-технической и патентной информации по химии и химической технологии.
2. Системы научно-технической информации по химии и химической технологии.
3. Информационные ресурсы научно-технических библиотек (в том числе электронные) по химии и химической технологии.
- 4 Ресурсы фундаментальной библиотеки СПбГТИ (ТУ).

5. Справочно-информационные базы данных и знаний по химии и химической технологии, а также по смежным дисциплинам.
6. Структура, функции и возможности баз данных Chemical Abstracts Service (CAS): REGISTRY, CAPLUS, CASREACT, CHEMLIST, CHEMCATS и др. Поисковый инструмент (машина) SciFinder. Информационная система CAS ONLINE.
7. Информационные online продукты Elsevier B.V. Структура, функции и возможности баз данных Reaxys (Beilstein, Gmelin, поисковый инструмент (машина) Reaxys Chemistry Discovery Engine). Полнотекстовая база данных Science Direct. Библиографическая база данных Scopus.
8. Информационные ресурсы Clarivate Analytics. Платформы баз данных Web of Science и Web of Science. Программа для работы со ссылками EndNote online. Идентификатор ученого ResearcherID.
9. Российская научная электронная библиотека eLIBRARY.RU. Российский индекс научного цитирования (РИНЦ).
10. Структура, функции и возможности сетевой системы баз данных STN International – поисково-аналитического инструмента для науки и образования.
11. Ресурсы и базы данных ВИНТИ по химии и химической технологии.
12. Патентные базы данных: Роспатент, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office.
13. Базы данных MEDLINE (National Library of Medicine, US). База данных по биологической активности химических соединений PubChem (NSBI, National Library of Medicine, US).
14. Кембриджская база структурных данных Cambridge Structural Database (CSD) как компонент Cambridge Structural Database System (CSD System) (Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC), UK).
15. Коммерческая база eMolecules (eMolecules Inc.).
16. Традиционные (рутинные) информационные технологии. Рациональный поиск информации по химии и химической технологии на традиционных (бумажных) носителях.
17. Современные (передовые) информационные технологии. Методологические основы поиска информации по химии и химической технологии с помощью информационных технологий удаленного доступа (сетевых телекоммуникационных технологий) – с помощью сети Интернет и локальных сетей.
18. Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных CAS.
19. Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных Reaxys.
20. Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных сетевой системы STN International.

21. Поиск информации по химии и химической технологии в библиографических базах данных Scopus.
22. Поиск информации по химии и химической технологии в библиографических базах данных Web of Science.
23. Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных Российской научной электронной библиотеке eLIBRARY.RU.
24. Поиск патентной информации (патентный поиск) в базах данных Роспатента, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office.
25. Поиск информации в структурных базах данных CSD.
26. Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных ВИНТИ.

Пример варианта экзаменационного билета:

Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
(технический университет)  
Кафедра химической технологии органических красителей  
и фототропных соединений  
Факультет химической и биотехнологии  
Учебная дисциплина «Основы химической информатики»

Экзаменационный билет №1

1. Структура, функции и возможности баз данных Chemical Abstracts Service (CAS): REGISTRY, CAPLUS, CASREACT, CHEMLIST, CHEMCATS и др. Поисковый инструмент (машина) SciFinder.
2. Практическое задание по информационному поиску.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_ С.М. Рамш

## 7 Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины

### а) печатные издания:

1. 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; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра органической химии. – Санкт-Петербург : СПбГТИ(ТУ), 2013. – 68 с.

### б) электронные учебные издания:

1. 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; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра органической химии. – Электронные текстовые данные. – Санкт-Петербург : СПбГТИ(ТУ), 2013. – 68 с. // СПбГТИ. Электронная библиотека. – URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 23.03.2021). – Режим доступа : для зарегистрированных пользователей.

2. Рудакова, Л.В. Информационные технологии в аналитическом контроле биологически активных веществ : Монография / Л.В. Рудакова, О.Б. Рудаков. – 2-е изд., испр. – Электронные. текстовые данные. – Санкт-Петербург ; Москва ; Краснодар : Лань, 2015. – 360 с. : ил. – (Учебники для вузов. Специальная литература). – ISBN 978-5-8114-1870-1 // Лань : электронно-библиотечная система. – URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 01.04.2021). – Режим доступа : по подписке.

## 8 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

### 8.1. Интернет-ресурсы общего характера

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

Электронно-библиотечные системы:

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

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

Сайт фундаментальной библиотеки СПбГТИ(ТУ): <http://bibl.lti-gti.ru>.

### 8.2. Интернет-ресурсы по химии и химической технологии

Для расширения знаний по дисциплине рекомендуется использовать следующие универсальные Интернет-ресурсы для химика-технолога.

*Специализированные информационные системы, базы данных, базы знаний, сайты для поиска учебной и научной информации по химии и химической технологии:*

<http://www.acscinf.org/>

<http://www.acscinf.org/content/chemical-information-literacy>

<http://scholar.google.ru>

<http://scienceresearch.com>

<http://www.nature.com>

[www.chemweb.com](http://www.chemweb.com)

<http://www.iupac.org/>

[http://en.wikibooks.org/wiki/Chemical\\_Information\\_Sources](http://en.wikibooks.org/wiki/Chemical_Information_Sources)

<http://www.chem.vsu.ru/content/links.html> (обширная сводка химических сайтов «Химия в сети Internet»)

<http://www.doaj.org/> (Directory of open access journals)

<http://www.chemport.ru/> (сайт для химиков)

<http://www.liv.ac.uk/Chemistry/Links/links.html> («линки» для химиков, University of Liverpool), не работает в настоящее время

<http://geo.gr.isu.ru/leos/index.php> (СИС «Химический ускоритель»), не работает в настоящее время

<http://chemexpress.fatal.ru/Navigator.html> («Химический навигатор»), не работает в настоящее время

<http://www.organic-chemistry.org/>

<http://www.chem.sc.edu/faculty/morgan/resources/links.html>

<http://www.chem.ucla.edu/chempointers.html>

[www.abc.chemistry.bs.u.by](http://www.abc.chemistry.bs.u.by) (портал Белорусского государственного университета – Азбука Web-поиска для химиков. Пособия по поиску патентов, баз данных, статей)

[www.chem.msu.ru](http://www.chem.msu.ru) (химический портал МГУ – базы данных, полезная информация, ссылки и т. д.)

#### *Справочники, энциклопедии:*

**ULLMANN'S Encyclopedia of Industrial Chemistry**

<http://eu.wiley.com/WileyCDA/Section/id-407379.html>

[http://media.wiley.com/assets/5018/03/Ullmanns2011\\_Contents.pdf](http://media.wiley.com/assets/5018/03/Ullmanns2011_Contents.pdf)

<http://onlinelibrary.wiley.com/book/10.1002/14356007>

**Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology**

<http://eu.wiley.com/WileyCDA/Section/id-302479.html?query=Kirk-Othmer>

**Справочник химика 21. Химия и химическая технология. On-line ресурс**

<http://chem21.info/map/>

**List of academic databases and search engines**

[https://en.wikipedia.org/wiki/List\\_of\\_academic\\_databases\\_and\\_search\\_engines](https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_academic_databases_and_search_engines)

#### *Базы данных по химии:*

**Базы данных Chemical Abstracts Service**

<http://www.cas.org/expertise/cascontent/> (поиск с помощью поискового инструмента «SciFinder»)

<http://onlinelibrary.wiley.com/book/10.1002/9780470749418>

<http://www.cas.org/products/scifinder/system-requirements-web>

<http://www.cas.org/training/scifinder>

**Базы данных STN-International**

[http://www.nioch.nsc.ru/sibstn/onlin\\_db.htm](http://www.nioch.nsc.ru/sibstn/onlin_db.htm)

<http://www.nioch.nsc.ru/sibstn/clusters.htm>

<http://www.cas.org/support/stngen/dbss/index.html>  
<https://stnweb.cas.org/>  
<http://www.stn-international.com/index.php?id=123>  
<http://www.stn-international.de/index.php?id=123>  
<https://stneasy.cas.org/html/english/login1.html?service=STN>

**Базы данных ELSEVIER/REAXYS (Beilstein&Gmelin)**

<https://www.elsevier.com/solutions/reaxys>  
<https://www.reaxys.com/reaxys/session.do>

(поиск с помощью поискового инструмента «Reaxys Chemistry Discovery Engine»)

**Базы данных ScienceDirect (Elsevier)**

<http://www.sciencedirect.com/science>  
<http://www.scopus.com/home.url>  
<http://www.mendeley.com/features/>

**Базы данных Web of Science (Clarivate Analytics)**

<http://webofscience.com>

**ChemBioFinder.com (PerkinElmer Informatics, Chembridge.com)**

<http://chembiofinder.cambridgesoft.com/chembiofinder/Forms/Home/ContentArea/Home.aspx>

**База данных Royal Society of Chemistry ChemSpider** (бесплатная, the database contains information on more than 40 million molecules from over 500 data sources)

<http://www.chemspider.com>

**The Cambridge Structural Database**

<http://www.ccdc.cam.ac.uk/solutions/csd-system/components/csd/>

**Базы данных MEDLINE (PubChem databases)**

[http://www.fc2.nlm.nih.gov.nlm\\_eresources/eresources/search\\_database.cfm](http://www.fc2.nlm.nih.gov.nlm_eresources/eresources/search_database.cfm)  
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/help.html>  
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/search/search.cgi>  
<http://www.hubmed.org/>  
<http://www.nioch.nsc.ru/sbstn/databases/medline.htm>  
<http://www.disser.ru/library/31/188.htm>  
<http://voliadis.ru/pubmed-tips>

**Базы спектральных данных органических соединений**

<http://sdfs.db.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/ENTRANCE.cgi>

Free Spectral Database (сотни тысяч спектров) [SpectraBase](#) (Wiley)

**Базы данных ВИНТИ**

<http://www2.viniti.ru/>

**Термические константы веществ**

<http://www.chem.msu.su/cgi-bin/tkv.pl?show=welcme.html>

**The Merck Index Online<sup>SM</sup>**

<http://library.dialog.com/bluesheets/html/b10304.html>

[http://www.dmoz.org/Science/Chemistry/Chemical\\_Databases/](http://www.dmoz.org/Science/Chemistry/Chemical_Databases/)



<http://www.emolecules.com/> (Find [Suppliers and Information](#) for over 8 Million Unique Chemicals!)

<http://cds.dl.ac.uk/> (the Chemical Database Service)

<http://library.dialog.com/bluesheets/html/bls0016.html#SB0016> (Databases by Subject Category: Science-Chemistry)

<http://www.crct.polymtl.ca/FACT/index.php> (Facility for the Analysis of Chemical Thermodynamics)

[http://www.google.ru/Top/Science/Chemistry/Chemical\\_Databases/](http://www.google.ru/Top/Science/Chemistry/Chemical_Databases/)

<http://chem-v.narod.ru/data.htm> (сводка баз данных)

### *Патентные базы:*

<http://www.abc.chemistry.bsu.by/patent/default.htm> (патентные базы данных, руководство к практикуму)

### **European Patent Office. Espacenet – Patent search**

<http://www.epo.org/searching/free/espacenet.html>

[http://worldwide.espacenet.com/advancedSearch?locale=en\\_EP](http://worldwide.espacenet.com/advancedSearch?locale=en_EP)

<http://worldwide.espacenet.com/> (Европейское патентное ведомство)

[https://ru.espacenet.com/?locale=ru\\_RU](https://ru.espacenet.com/?locale=ru_RU) (Европейское патентное ведомство, русскоязычный сайт)

### **The US Patent and Trademark Office**

<http://www.uspto.gov/>

<http://www.google.com/googlebooks/uspto.html>

<http://www.google.com/googlebooks/uspto-patents-pair.html>

<http://www.us-patent-search.com/>

<http://www.patentstorm.us/> (патенты США, аннотации)

[www.freepatentsonline.com](http://www.freepatentsonline.com) (бесплатные патенты США, доступ к полнотекстовым файлам)

### **Google Patents**

<http://www.google.com/patents>

### **ФГУ ФИПС**

[www.fips.ru](http://www.fips.ru) (Роспатент)

<https://patents.su/> (база авторских свидетельств СССР)

<https://yandex.ru/patents> (сервис поиска патентов компании «Яндекс», созданный при содействии Федеральной службы по интеллектуальной собственности (Роспатента))

### *Химические библиотеки:*

#### **Библиотека химического факультета МГУ**

<http://www.chem.msu.ru/rus/library/welcome.html>

#### **Электронная библиотека учебных материалов по химии МГУ**

<http://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/welcome.html>

**Зарубежные журналы через Интернет МГУ**  
<http://www.chem.msu.ru/rus/library/licenced.html>

**Научная библиотека им. М. Горького СПбГУ, электронные ресурсы по химии**  
<http://cufts.library.spbu.ru/CRDB/SPBGU/browse/facets/subject/5>

**Информационно-библиотечный центр им. С.И. Сулименко РХТУ им. Д.И. Менделеева, электронные информационные ресурсы**  
<http://lib.muctr.ru/page/117>

**Научная электронная библиотека**  
<http://elibrary.ru/defaultx.asp>

**Поиск\_электронных\_книг**  
<http://www.poiskknig.ru/>

**Научная литература в Интернете**  
<http://www.scintific.narod.ru/literature.htm>

*Электронная библиотека по химии и технике*  
<http://rushim.ru/books/books.htm>

**Книги по химии и химической технологии**  
<http://www.chemport.ru/index.php?cid=29>

**НИЦ СПбГТУРП. Химия и химическая технология. Более 1000 наименований учебников и монографий**  
<http://www.nizrp.narod.ru/chem.htm>

*Библиотеки общего профиля:*

**Российская государственная библиотека**  
<http://www.rsl.ru>

**Российская национальная библиотека**  
<http://www.nlr.ru>

**Государственная публичная научно-техническая библиотека России**  
<http://www.gpntb.ru>

**Библиотека по естественным наукам РАН**  
<http://www.benran.ru/>

**Библиотека РАН (БАН)**  
<http://www.rasl.ru/>

**Фундаментальная библиотека СПбГТИ (ТУ)**  
<http://bibl.lti-gti.ru/>

**Библиотека Конгресса США**  
<http://www.loc.gov/index.html>

**Британская библиотека**

<http://portico.bl.uk>

**Электронная библиотека диссертаций РГБ**

<http://www.diss.rsl.ru>

*Издательства научно-технической литературы:*

**Elsevier**

[http://www.elsevier.com/wps/find/homepage.cws\\_home](http://www.elsevier.com/wps/find/homepage.cws_home)

<http://health.elsevier.ru/>

<http://elsevierscience.ru/>

**Wiley-VCH**

<http://www.chemistryviews.org/view/0/index.html>

<http://onlinelibrary.wiley.com/?CRETRY=1&SRETRY=0>

**Springer**

<http://www.link.springer.com/>

*Хемоинформатика (статья в Википедии):*

<https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A5%D0%B5%D0%BC%D0%BE%D0%B8%D0%BD%D1%84%D0%BE%D1%80%D0%BC%D0%B0%D1%82%D0%B8%D0%BA%D0%B0>

*Разработчики программных продуктов по химии, молекулярная графика  
(Chem-Soft):*

**Advanced Chemistry Development Inc. (ACD/Labs)**

<http://www.acdlabs.com/home/>

**CambridgeSoft Corporation**

<http://www.cambridgesoft.com/>

**Dassault Systèmes/BIOVIA/Accelrys/Symyx/MDL**

<http://accelrys.com/>

**ChemAxon**

<https://www.chemaxon.com/products/marvin/marvinsketch>

<https://www.chemaxon.com/products/marvin/marvinsketch>

**World Index of Molecular Visualization Resources**

[www.molvisindex.org](http://www.molvisindex.org)

<http://molvis.sdsc.edu/visres/index.html>

**Mercury – Crystal Structure Visualisation**

[http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd\\_system/mercury\\_csd/](http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd_system/mercury_csd/)

<http://jmol.sourceforge.net/> (Molecular graphic: Jmol: an open-source Java viewer for chemical structures in 3D)

<http://openrasmol.org/> (Home Page for RasMol and OpenRasMol Molecular Graphics Visualisation Tool)

<http://edchemistry.tripod.com/graphics.htm> (visualization and animations in chemistry)

***Вычислительная химия:***

**Hypercube, Inc.**

<http://www.hyper.com/>

***Разработчики программных продуктов по химической технологии  
(Chem-Engineering):***

**Process Systems Enterprise**

<http://www.psenterprise.com/>

**Invensys SimSci-Esscor**

<http://iom.invensys.com/EN/Pages/SimSci-Esscor.aspx>

**Aspentech**

<http://www.aspentech.com/Company/About-AspenTech/>  
[http://www.aspentech.com/corporate/press/media\\_kit.aspx](http://www.aspentech.com/corporate/press/media_kit.aspx)

**Aspentech HYSYS**

<http://www.aspentech.com/core/asp-hysys.aspx>

***Математические вычисления и инженерная графика:***

**PTC Mathcad**

<http://www.ptc.com/product/mathcad/>

**Autodesk (Autocad)**

<http://www.autodesk.com/products/autodesk-autocad/overview>

**АСКОН (КОМПАС)**

<http://edu.ascon.ru/download/>  
<http://kompas.ru/>

***Химические общества, организации, союзы:***

**Am. Chem. Soc.**

<http://www.acs.org/content/acs/en.html>

**RSC**

<http://www.rsc.org/>

**РХО им. Д.И. Менделеева**

<http://www.chemsoc.ru/>  
<http://www.chemsoc.ru/regions/Spb/index.php>

**IUPAC**

<http://old.iupac.org/index.html>

[http://goldbook.iupac.org/structure\\_search.html](http://goldbook.iupac.org/structure_search.html)

***Производители химической и фармацевтической продукции:***

<http://www.chemicalinfo.ru/>  
<http://rccnews.ru/Rus/About/>

***Стандарты:***

**Росстандарт**

<http://www.gost.ru/wps/portal/pages.Main>

<http://www.technormativ.ru/>

**Роспромтест**

<http://www.rospromtest.ru/>

**Центр по экономическим классификациям**

<http://www.okpd.org/index.htm>

**NIST**

<http://nist.gov/>

<http://webbook.nist.gov/>

<http://webbook.nist.gov/chemistry/>

***Электронно-библиотечные системы (электронные ресурсы), предлагаемые библиотекой СПбГТИ (ТУ):***

<http://bibl.lti-gti.ru/main.html>

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

Все виды занятий по дисциплине «Основы химической информатики» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТО:

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.

СТО СПбГТИ (ТУ) 016-2015. КС УКДВ. Порядок организации и 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.

Рабочей программой дисциплины «Основы химической информатики» предусмотрена самостоятельная работа студентов (СРС) в объеме 113 часов. Самостоятельная работа проводится с целью углубления и расширения знаний по дисциплине и предусматривает:

чтение студентами рекомендованной основной, дополнительной и вспомогательной литературы, в том числе для усвоения теоретического и практического материала дисциплины, вынесенного на самостоятельное изучение;

подготовку к лекциям и практическим занятиям;

подготовку к контрольным работам (ответы на контрольные вопросы и выполнение тестовых поисков информации);

подготовку к коллоквиуму;

работу с рекомендованными Интернет-источниками научно-технической информации;

интерактивное обучение с использованием рекомендованных электронных учебных пособий, доступных программно-обучающих модулей и телекоммуникационных технологий *online* доступа к соответствующим программным продуктам, базам данных и обучающим системам, в том числе с помощью компьютерных симуляций.

Планирование времени на самостоятельную работу лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях или полученный в виде раздаточных материалов, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в списке рекомендованной литературы. По каждому из вопросов для самостоятельного изучения следует сначала прочитать рекомендованную литературу, а затем составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания, являющихся основополагающими в этом вопросе и необходимых для усвоения последующих разделов дисциплины. В случае возникновения трудностей при самостоятельном усвоении материала рекомендуется составить перечень непонятных вопросов и обратиться за консультацией к преподавателю.

В течение семестра студенты, руководствуясь РПД, прорабатывают вопросы для самостоятельного изучения (см. п. 4.4.1), находят ответы на контрольные вопросы и готовятся к выполнению контрольных работ (см. разд. 6, п. 4.4.2).

Все практические занятия, за исключением контрольных работ, проводятся в интерактивном режиме в компьютерном классе. Они проводятся с использованием раздаточных материалов, электронных учебных пособий, компьютерных терминалов. Интерактивные практические занятия представляют собой мультимедийные презентации в диалоговом режиме; выполнение в режиме прямого общения с преподавателем индивидуальных тестовых заданий по информационному поиску научно-технической информации с помощью онлайн-ресурсов (источников информации), с последующим разбором конкретных ситуаций. Некоторые задачи по поиску информации повышенной сложности формулируются в виде творческих заданий и решаются методом «мозгового штурма» в малых группах.

Лекции проводятся с помощью мультимедийных презентаций, с использованием раздаточных материалов, электронных учебных пособий, онлайн-ресурсов Интернет-источников информации.

Для достижения планируемых результатов обучения в дисциплине «Основы химической информатики» используются различные образовательные технологии:

1. *Информационно-развивающие технологии*, направленные на овладение большим запасом знаний, запоминание и свободное оперирование ими. Используется лекционно-семинарский метод, самостоятельное изучение литературы, применение современных информационных технологий для самостоятельного пополнения знаний, включая сетевые

телекоммуникационные (Интернет) технологии.

2. *Деятельностные практико-ориентированные технологии*, направленные на формирование системы профессиональных практических умений, обеспечивающих возможность качественно осуществлять профессиональную деятельность. Используется анализ полученной информации, выбор метода поиска информации, в зависимости от объекта поиска, и его практическая реализация.

3. *Развивающие проблемно-ориентированные технологии*, направленные на формирование и развитие проблемного мышления, мыслительной активности, способности проблемно мыслить, видеть и формулировать проблемы, выбирать способы и средства для их решения. Используются следующие виды проблемного обучения: освещение основных проблем изучаемой дисциплины на лекциях, учебные дискуссии, решение задач повышенной сложности. Преподаватель лишь создает проблемную ситуацию, а разрешают ее обучаемые в ходе самостоятельной деятельности.

4. *Личностно-ориентированные технологии обучения*, обеспечивающие в ходе учебного процесса учет различных способностей обучающихся, создание необходимых условий для развития их индивидуальных способностей, развитие активности личности в учебном процессе. Личностно-ориентированные технологии обучения реализуются в результате индивидуального общения преподавателя и студента на консультациях, при решении индивидуальных тестовых задач (выполнении домашних заданий) и подготовке отчетов по этим задачам.

Для целенаправленного и эффективного формирования запланированных компетенций у обучающихся выбраны следующие сочетания форм организации учебного процесса и методов активизации образовательной деятельности:

*Методы активизации образовательной деятельности и формы организации обучения*

Методы активизации образовательной деятельности	ФОО		
	Лекции	Практические занятия	СРС
IT-методы	+	+	+
Работа в команде		+	
Case-study		+	
Методы проблемного обучения	+		+
Обучение на основе опыта		+	+
Опережающая самостоятельная работа			+
Проектный метод			+
Поисковый метод	+		+
Исследовательский метод		+	+

**Интерактивные формы проведения практических занятий**

№ раздела дисциплины	Наименование темы (раздела) дисциплины	Интерактивные формы проведения занятий	Трудоемкость (час.)
2	Системы научно-технической информации по химии и химической технологии. Специализированные порталы представления научной информации,	Творческое задание, мозговой штурм, метод кейсов. Компьютерный информационный поиск в	3

№ раздела дисциплины	Наименование темы (раздела) дисциплины	Интерактивные формы проведения занятий	Трудоемкость (час.)
	поисковые системы поиска научной информации по химии и химической технологии	режиме <i>online</i> и <i>offline</i> с последующим разбором конкретных ситуаций	
3	Информационные ресурсы крупнейших публичных и университетских научно-технических библиотек (в том числе электронные) по химии и химической технологии. Современные электронные библиотеки. Получение доступа к базам данных и электронным версиям периодических изданий ведущих издательств по химии и химической технологии	Творческое задание, мозговой штурм, метод кейсов. Компьютерный информационный поиск в режиме <i>online</i> и <i>offline</i> с последующим разбором конкретных ситуаций	3
4	Ресурсы фундаментальной библиотеки СПбГТИ (ТУ). Возможности Фундаментальной библиотеки СПбГТИ (ТУ) по предоставлению доступа к информационным сетям и пользованию электронными библиотеками, специализированными базами данных по химии и химической технологии	Творческое задание, мозговой штурм, метод кейсов. Компьютерный информационный поиск в режиме <i>online</i> и <i>offline</i> с последующим разбором конкретных ситуаций	3
5	Электронные справочно-информационные базы данных и знаний по химии и химической технологии, а также по смежным дисциплинам	Творческое задание, мозговой штурм, метод кейсов. Компьютерный информационный поиск в режиме <i>online</i> и <i>offline</i> с последующим разбором конкретных ситуаций	3
9	Ресурсы и базы данных ВИНТИ по химии и химической технологии	Творческое задание, мозговой штурм, метод кейсов. Компьютерный информационный поиск в режиме <i>online</i> и <i>offline</i> с последующим разбором конкретных ситуаций	3
10	Патентные базы данных: Роспатент, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office	Творческое задание, мозговой штурм, метод кейсов. Компьютерный информационный поиск в режиме <i>online</i> и <i>offline</i> с последующим разбором конкретных ситуаций	3
11	Базы данных MEDLINE (National Library of Medicine, US). База по	Творческое задание, мозговой штурм, метод	3



№ раздела дисциплины	Наименование темы (раздела) дисциплины	Интерактивные формы проведения занятий	Трудо- емкость (час.)
	биологической активности химических соединений PubChem (NSBI, National Library of Medicine, US). Кембриджская база структурных данных Cambridge Structural Database (CSD) как компонент Cambridge Structural Database System (CSD System) (Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC), UK). Коммерческая база eMolecules (eMolecules Inc.)	кейсов. Компьютерный информационный поиск в режиме <i>online</i> и <i>offline</i> с последующим разбором конкретных ситуаций	
12	Традиционные (рутинные) информационные технологии. Рациональный поиск информации по химии и химической технологии на традиционных (бумажных) носителях	Творческое задание, мозговой штурм, метод кейсов. Компьютерный информационный поиск в режиме <i>online</i> и <i>offline</i> с последующим разбором конкретных ситуаций	3
13	Современные (передовые) информационные технологии. Методологические основы поиска информации по химии и химической технологии с помощью информационных технологий удаленного доступа (сетевых телекоммуникационных технологий) – с помощью сети Интернет и локальных сетей	Творческое задание, мозговой штурм, метод кейсов. Компьютерный информационный поиск в режиме <i>online</i> и <i>offline</i> с последующим разбором конкретных ситуаций	3
14	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных CAS	Творческое задание, мозговой штурм, метод кейсов. Компьютерный информационный поиск в режиме <i>online</i> и <i>offline</i> с последующим разбором конкретных ситуаций	6
15	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных Reaxys	Творческое задание, мозговой штурм, метод кейсов. Компьютерный информационный поиск в режиме <i>online</i> и <i>offline</i> с последующим разбором конкретных ситуаций	6
16	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных сетевой системы STN International, электронной библиотеки	Творческое задание, мозговой штурм, метод кейсов. Компьютерный	3

№ раздела дисциплины	Наименование темы (раздела) дисциплины	Интерактивные формы проведения занятий	Трудоемкость (час.)
	eLIBRARY.RU, библиографических базах Scopus и Web of Science	информационный поиск в режиме <i>online</i> и <i>offline</i> с последующим разбором конкретных ситуаций	
17	Поиск патентной информации (патентный поиск) в базах данных Роспатента, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office. Поиск структурной информации в базах данных CSD	Творческое задание, мозговой штурм, метод кейсов. Компьютерный информационный поиск в режиме <i>online</i> и <i>offline</i> с последующим разбором конкретных ситуаций	3
18	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных ВИНТИ	Творческое задание, мозговой штурм, метод кейсов. Компьютерный информационный поиск в режиме <i>online</i> и <i>offline</i> с последующим разбором конкретных ситуаций	3
	<b>Всего (час.)</b>		<b>48</b>

## 10 Перечень информационных технологий и программного обеспечения, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

### 10.1 Информационные технологии

Для усвоения данной учебной дисциплины используются как традиционные, так и телекоммуникационные (удаленного доступа, сетевые) информационные технологии (ИТ) в приложении к химии и химической технологии. Основной упор сделан на использование на практических занятиях телекоммуникационных технологий.

Под традиционными ИТ подразумеваются *рутинные* методы поиска информации с помощью традиционных библиотечных технологий (с использованием *печатной* учебной, научной, патентной, справочной и периодической литературы по химии и химической технологии).

Под телекоммуникационными ИТ понимаются технологии рационального поиска и обработки информации с помощью *современных устройств* мобильной связи, передачи, хранения (накопления), обработки и представления данных (широкополосный Интернет, персональные компьютеры, планшеты, смартфоны и т. п.) и *современных поисковых инструментов* (машин) – аппаратно-программных комплексов для удаленного доступа к специализированным мировым информационным ресурсам по химии и химической технологии в сети Интернет (сетевые информационные технологии), в том числе – новейшие библиотечные информационные технологии, использующие соответствующее программное обеспечение и источники информации на электронных носителях.

Кроме того, в учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование следующих информационных технологий и возможностей компьютерного класса кафедры:

чтение лекций с использованием слайд-презентаций;  
взаимодействие с обучающимися на Медиа-портале института, посредством ЭИОС, электронной почты, мессенджеров и других сетевых технологий.

## 10.2 Программное обеспечение

### 10.2.1 Специальное программное обеспечение:

1. Специальные программные средства и технологии (программные продукты) важнейших информационно-поисковых систем по химии и химической технологии, доступные в режиме *online* на соответствующих сайтах, указанных в разделе 8: поисковый инструмент БД CAS «SciFinder», поисковый инструмент БД ELSEVIER/REAXYS, поисковые инструменты БД Science Direct, Scopus, Web of Science, eLIBRARY.RU, STN International, ВИНИТИ, Роспатента, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office, MEDLINE (PubChem), Cambridge Structural Database.
2. Программа представление структурных данных «Mercury» (бесплатная версия с сайта CCDC (см. раздел 8).
3. Программные продукты для расчетов и оптимизации процессов химической технологии: «Aspen Plus», «Aspen HYSYS», «CHEMCAD» и т. п. – от разработчиков программных продуктов по химической технологии (см. раздел 8).  
ASPEN Economic Evaluation v.8.4;  
SmartPlant P&ID 2009;  
SmartPlant 3D 2011 R1;  
Microsoft Project 2010.
4. БД Beilstein, Cambridge Structural Database на электронных носителях (кафедра физики СПбГТИ (ТУ), проф. Беляков А.В.).
5. Учебный пакет «STN-Mentor» системы STN International на электронных носителях (кафедра системного анализа СПбГТИ (ТУ), доц. Ананченко И.В.).
6. ИПС «Web ИРБИС» для поиска библиографической информации на сайте ФБ СПбГТИ (ТУ).
7. Электронно-библиотечные системы (электронные ресурсы), предлагаемые на сайте ФБ СПбГТИ (ТУ).

### 10.2.2 Универсальное программное обеспечение:

1. Стандартные программные продукты «Microsoft Office».
2. Компьютерная молекулярная графика: бесплатно распространяемые (no fee, free, trial versions) на соответствующих сайтах (см. ниже) пакеты программ «ACD/Labs» («ACD/ChemSketch»), «MDL/ISIS» / «Symyx» / «Accelrys» / «BIOVIA» / Dassault Systèmes («ISIS Draw» и более поздние версии этого продукта – «Symyx Draw», «Accelrys Draw», «BIOVIA Draw»), «ChemOffice» («ChemDraw») и т. п. – от разработчиков программных продуктов по химии (см. раздел 8).
3. Специализированные программные средства и технологии (пакеты прикладных программ): «MATHCAD», системы автоматизированного проектирования и компьютерной графики «AUTOCAD», «КОМПАС-3D» и т. п.

## 10.3. Базы данных и информационные справочные системы

См. раздел 8.

Справочно-поисковая система «Консультант-Плюс».

## 11 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Для проведения занятий по дисциплине «Основы химической информатики» имеется необходимая материально-техническая база: лекционная аудитория, оснащенная мультимедийным проектором; специализированный компьютерный класс, с подключенными периферийными устройствами и оборудованием для выхода в локальную сеть СПбГТИ (ТУ) и Интернет; компьютерное (*hardware*) и программное (*software*) обеспечение для выполнения практических работ, а также для самостоятельной работы по дисциплине; Фундаментальная библиотека с читальными залами, оснащенными компьютерами, подключенными к локальной сети СПбГТИ (ТУ). с возможностью выхода в Интернет.

### Перечень учебных помещений и их оборудования

Адрес	Наименование оборудованных учебных кабинетов/объектов для проведения практических занятий	Оснащенность оборудованных учебных кабинетов/объектов для проведения практических занятий
190013, г. Санкт-Петербург, Московский проспект, д. 24-26/49, лит. Б	Кафедра ХТОКиФС, аудитория (помещение №6)	Специализированная мебель (56 посадочных мест), доска меловая/маркерная, мультимедийный проектор с экраном, ноутбук
190013, г. Санкт-Петербург, Московский проспект, д. 24-26/49, лит. Б	Кафедра ХТОКиФС, компьютерный класс (помещение №5)	Специализированная мебель (компьютерные столы, 15 рабочих мест), персональные компьютеры, 15 шт., с кабельным подключением к сети Интернет
190013, г. Санкт-Петербург, Московский проспект, д. 24-26/49, лит. Б	Кафедра ХТОКиФС, учебная лаборатория (помещение № 29)	Специализированная мебель (лабораторные столы, вытяжные шкафы, 14 рабочих мест), насосы вакуумные мембранные, насосы вакуумные водоструйные, дистиллятор, шкафы сушильные (вакуумные), электронные весы, мешалки магнитные, устройства перемешивающие электромеханические, лабораторная химическая посуда, термометры, установка для перегонки с водяным паром, электрообогревающие устройства, оборудование для тонкослойной хроматографии, хроматоскоп, рН-метр
190013, г. Санкт-Петербург, Московский проспект, д. 24-26/49, лит. Б	Кафедра ХТОКиФС, лаборатория спектральных методов исследований (помещения №№3,	УФ-Вид спектрофотометры, ИК спектрофотометр

Адрес	Наименование оборудованных учебных кабинетов/объектов для проведения практических занятий	Оснащенность оборудованных учебных кабинетов/объектов для проведения практических занятий
Б	4)	
190013, г. Санкт-Петербург, Московский проспект, д. 24-26/49, лит. Б	Кафедра ХТОКиФС, помещение для самостоятельной работы студентов (помещение №1)	Специализированная мебель (12 посадочных мест), доска меловая, демонстрационный экран
190013, г. Санкт-Петербург, Московский проспект, д. 24-26/49, лит. Б	Кафедра ХТОКиФС, помещение для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования (помещение №20)	Специализированная мебель, оборудование для профилактического обслуживания учебного оборудования

#### Перечень компьютерной техники и сетевого оборудования

Наименование и марка оборудования	Назначение и краткая характеристика оборудования	Год ввода в эксплуатацию
Проектор Acer X113PH_800×600	Презентация иллюстративных материалов	2016
Компьютерный класс кафедры, компьютеры PC, 15 шт.	Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п.	2017
Ноутбук MSI GP72 6QF-273RU Ci7-6700HQ 2.6/17.3"FHD/GTX960/W10/8G/1000/DVDRW/WF/BT/Cam_Blac	Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п.	2016
Ноутбук Asus X756UV Ci3-6100U 2.3/17.3"/GT920MX/W10/4G/1000/DVDRW/WF/BT/Cam_brown_	Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п.	2016
Ноутбук Asus X756UV Ci3-6100U 2.3/17.3"/GT920MX/W10/4G/1000/DVDRW/WF/BT/Cam_brown_	Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п.	2016
Ноутбук Asus X751MA PQC N3530	Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п.	2014

Наименование и марка оборудования	Назначение и краткая характеристика оборудования	Год ввода в эксплуатацию
Ноутбук Asus X751MA PQC N3530	Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п.	2014
Компьютер KEY HM Pro H-505-4G1000_Ci5-4570	Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п.	2014
Компьютер KEY HM Pro H-505-4G1000_Ci5-4570	Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п.	2014
Общеинститутские серверы	Кабельное сетевое соединение. Широкополосное проводное подключение к локальной сети, выход в Интернет. Кабельная технология Ethernet, скорость 100 Мбит в сек.	
Общеинститутские серверы	Беспроводное сетевое соединение. Беспроводное подключение к локальной сети, выход в Интернет. Беспроводная технология WiFi, скорость 50 Мбит в сек.	

## **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  
«Основы химической информатики»**

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

<b>Компетенции</b>		
<b>Индекс</b>	<b>Формулировка</b>	<b>Этап формирования</b>
ПК-1 (01) ПК-6 (02)	Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок при исследовании методов синтеза и свойств продуктов тонкого органического синтеза, органических красителей и фототропных соединений	промежуточный
ПК-5 (01) ПК-7 (02)	Организация аналитического контроля этапов разработки продуктов тонкого органического синтеза с заданными свойствами	промежуточный

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

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-1.1 (01). ПК-6.1 (02). Проведение работ по поиску научно-технической информации и результатов исследований	Знает традиционные источники и способы получения информации по химии и химической технологии (ЗН-1)	Правильные ответы на вопросы №1-4, 11, 12 к экзамену	Знание не полное, допускает частые ошибки в ответах на вопросы, но в основном справляется с ответами с помощью наводящих вопросов	Знание полное, допускает отдельные ошибки в ответах на вопросы, но полностью справляется с ответами с помощью наводящих вопросов	Знание полное, безошибочно отвечает на вопросы
	Умеет использовать традиционные информационные технологии для получения научно-технической информации, необходимой для целей профессиональной деятельности (У-1)	Правильные ответы на вопросы №16, 24, 26 к экзамену	Реализует умение не в полной мере, допускает ошибки в применении знаний и навыков при реализации умения, но в основном справляется с поставленной задачей с подсказками преподавателя	Реализует умение в полной мере, допускает отдельные ошибки в применении знаний и навыков при реализации умения, но полностью справляется с поставленной задачей с небольшими подсказками преподавателя	Реализует умение безошибочно, в полной мере



Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
	Владеет навыками рутинного поиска информации по химии и химической технологии с помощью традиционных библиотечных поисковых систем и технологий (с использованием печатной учебной и научно-технической (энциклопедии, справочники, монографии, периодические издания, патенты) литературы по химии и химической технологии) (Н-1)	Правильные ответы на вопросы №16, 24, 26 к экзамену	Владеет навыками не в полной мере, допускает ошибки в их использовании, но в основном справляется с поставленной задачей с подсказками преподавателя	Владеет навыками в полной мере, допускает отдельные ошибки в их использовании, но полностью справляется с поставленной задачей с небольшими подсказками преподавателя	Владеет навыками в полной мере
ПК-5.5 (01). ПК-7.1 (02). Организация поиска научно-технической информации о продуктах тонкого органического синтеза	Знает современные источники и способы получения информации по химии и химической технологии (ЗН-2)	Правильные ответы на вопросы №1-3, 5-15, 17 к экзамену	Знание не полное, допускает частые ошибки в ответах на вопросы, но в основном справляется с ответами с помощью наводящих вопросов	Знание полное, допускает отдельные ошибки в ответах на вопросы, но полностью справляется с ответами с помощью наводящих вопросов	Знание полное, безошибочно отвечает на вопросы
	Умеет использовать современные телекоммуникационные (удаленного доступа, сетевые) информационные	Правильные ответы на вопросы №17-26 к экзамену	Реализует умение не в полной мере, допускает ошибки в применении знаний и навыков при	Реализует умение в полной мере, допускает отдельные ошибки в применении знаний и навыков при	Реализует умение безошибочно, в полной мере

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
	технологии для получения научно-технической информации, необходимой для целей профессиональной деятельности (У-2)		реализации умения, но в основном справляется с поставленной задачей с подсказками преподавателя	реализации умения, но полностью справляется с поставленной задачей с небольшими подсказками преподавателя	
	Владеет навыками рационального поиска информации по химии и химической технологии с помощью современных устройств (девайсов, гаджетов) мобильной связи, хранения, обработки и представления данных (персональных компьютеров (ПК), планшетов, смартфонов и т. п.) и современных поисковых инструментов (машин), базирующихся на информационных технологиях удаленного доступа к специализированным мировым информационным ресурсам в сети Интернет (телекоммуникационные	Правильные ответы на вопросы №18-26 к экзамену	Владеет навыками не в полной мере, допускает ошибки в их использовании, но в основном справляется с поставленной задачей с подсказками преподавателя	Владеет навыками в полной мере, допускает отдельные ошибки в их использовании, но полностью справляется с поставленной задачей с небольшими подсказками преподавателя	Владеет навыками в полной мере

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
	технологии, сетевые информационные технологии), а также на новейших библиотечных информационных технологиях, использующих соответствующее программное обеспечение и источники информации на электронных носителях (Н-2)				

### **3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации** (соответствуют контрольным вопросам по дисциплине, см. разд. 6)

#### **3.1 Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-1 (01), ПК-6 (02)**

1. Источники научно-технической и патентной информации по химии и химической технологии.
2. Системы научно-технической информации по химии и химической технологии.
3. Информационные ресурсы научно-технических библиотек (в том числе электронные) по химии и химической технологии.
- 4 Ресурсы фундаментальной библиотеки СПбГТИ (ТУ).
11. Ресурсы и базы данных ВИНТИ по химии и химической технологии.
12. Патентные базы данных: Роспатент, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office.
16. Традиционные (рутинные) информационные технологии. Рациональный поиск информации по химии и химической технологии на традиционных (бумажных) носителях.
24. Поиск патентной информации (патентный поиск) в базах данных Роспатента, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office.
26. Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных ВИНТИ.

#### **3.2 Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-5 (01), ПК-7 (02)**

1. Источники научно-технической и патентной информации по химии и химической технологии.
2. Системы научно-технической информации по химии и химической технологии.
3. Информационные ресурсы научно-технических библиотек (в том числе электронные) по химии и химической технологии.
5. Справочно-информационные базы данных и знаний по химии и химической технологии, а также по смежным дисциплинам.
6. Структура, функции и возможности баз данных Chemical Abstracts Service (CAS): REGISTRY, CAPLUS, CASREACT, CHEMLIST, CHEMCATS и др. Поисковый инструмент (машина) SciFinder. Информационная система CAS ONLINE.
7. Информационные online продукты Elsevier B.V. Структура, функции и возможности баз данных Reaxys (Beilstein, Gmelin, поисковый инструмент (машина) Reaxys Chemistry Discovery Engine). Полнотекстовая база данных Science Direct. Библиографическая база данных Scopus.
8. Информационные ресурсы Thomson Reuters. Платформа баз данных Web of Science. Программа для работы со ссылками EndNote online. Идентификатор ученого ResearcherID.
9. Российская научная электронная библиотека eLIBRARY.RU. Российский индекс научного цитирования (РИНЦ).
10. Структура, функции и возможности сетевой системы баз данных STN International – поисково-аналитического инструмента для науки и образования.
11. Ресурсы и базы данных ВИНТИ по химии и химической технологии.
12. Патентные базы данных: Роспатент, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office.
13. Базы данных MEDLINE (National Library of Medicine, US). База данных по биологической активности химических соединений PubChem (NSBI, National Library of Medicine, US).

14. Кембриджская база структурных данных Cambridge Structural Database (CSD) как компонент Cambridge Structural Database System (CSD System) (Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC), UK).
15. Коммерческая база eMolecules (eMolecules Inc.).
17. Современные (передовые) информационные технологии. Методологические основы поиска информации по химии и химической технологии с помощью информационных технологий удаленного доступа (сетевых телекоммуникационных технологий) – с помощью сети Интернет и локальных сетей.
18. Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных CAS.
19. Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных Reaxys.
20. Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных сетевой системы STN International.
21. Поиск информации по химии и химической технологии в библиографических базах данных Scopus.
22. Поиск информации по химии и химической технологии в библиографических базах данных Web of Science.
23. Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных Российской научной электронной библиотеке eLIBRARY.RU.
24. Поиск патентной информации (патентный поиск) в базах данных Роспатента, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office.
25. Поиск информации в структурных базах данных CSD.
26. Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных ВИНТИ.

#### **4. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций**

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме экзамена. Экзамен по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКДВ. Порядок организации и проведения зачетов и экзаменов. Шкала оценивания ответа на экзамене балльная («отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно») и соответствует СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015.