

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович  
Должность: Проректор по учебной и методической работе  
Дата подписания: 26.03.2025 13:42:10  
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

«\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2025 г.

**Рабочая программа дисциплины  
ОСНОВЫ ХИМИЧЕСКОЙ ИНФОРМАТИКИ**

Направление подготовки

**04.04.01 Химия**

Направленность программы магистратуры

**Медицинская химия**

Квалификация

**Магистр**

Форма обучения

**Очная**

Факультет **химической и биотехнологии**

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

Санкт-Петербург

2025

## ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность разработчика	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
заведующий кафедрой		профессор Рамш С.М.

Рабочая программа дисциплины «Основы химической информатики»  
обсуждена на заседании кафедры химической технологии  
органических красителей и фототропных соединений  
протокол от «23» января 2025 № 2

Заведующий кафедрой

С.М. Рамш

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химической и биотехнологии  
протокол от «20» февраля 2025 № 7

Председатель

М.В. Рутто

## СОГЛАСОВАНО

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

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.....	4
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.....	5
3. Объем дисциплины. ....	5
4. Содержание дисциплины. ....	6
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий. ....	6
4.2. Занятия лекционного типа.....	6
4.3. Занятия семинарского типа. ....	7
4.3.1. Семинары, практические занятия. ....	7
4.3.2. Лабораторные работы. ....	8
4.4. Самостоятельная работа обучающихся.....	9
4.5. Темы контрольных работ.....	9
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.....	9
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации. ....	9
7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины.....	10
8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.....	10
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины. ....	14
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.....	14
10.1. Информационные технологии.....	14
10.2. Программное обеспечение. ....	14
10.3. Базы данных и информационные справочные системы. ....	15
11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы. ....	15
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.....	15

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 магистратуры обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
<p><b>ПК-1</b> Способен проводить сбор научно-технической информации, анализ и обобщение научных данных для планирования и проведения исследований в области медицинской химии</p>	<p><b>ПК-1.4</b> Использование фундаментальных знаний в области медицинской химии для планирования и реализации исследовательских и прикладных работ по поиску и разработке новых лекарственных средств</p>	<p><b>Знать:</b> традиционные источники и способы получения информации по химии и химической технологии;</p> <p><b>Уметь:</b> использовать информационные технологии для получения научно-технической информации, необходимой для реализации исследований в области медицинской химии;</p> <p><b>Владеть:</b> навыками рутинного поиска информации по химии и химической технологии с помощью библиотечных поисковых систем и технологий, а также навыками рационального поиска информации с помощью современных устройств и поисковых инструментов, базирующихся на информационных технологиях удаленного доступа к специализированным информационным ресурсам в сети Интернет.</p>

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Основы химической информатики» (ФДТ.02) относится к факультативным дисциплинам и изучается и изучается на 2 курсе в 3 семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «Введение в медицинскую химию», «Методологические основы исследований в медицинской химии», «Международный рынок фармацевтических препаратов». Полученные в процессе изучения дисциплины «Современные подходы к поиску и разработке новых лекарственных средств» знания, умения и навыки могут быть использованы при прохождении производственной практики, а также при выполнении выпускной квалификационной работы.

## 3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, ЗЕ/академ. часов
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b> (зачетных единиц / академических часов)	<b>2/72</b>
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>54</b>
занятия лекционного типа	18
занятия семинарского типа, в т.ч.	36
семинары, практические занятия (в том числе практическая подготовка)	36(12)
лабораторные работы (в том числе практическая подготовка)	-
курсовое проектирование (КР или КП)	-
КСР	-
другие виды контактной работы	-
<b>Самостоятельная работа</b>	<b>18</b>
<b>Форма текущего контроля</b> (Кр, реферат, РГР, эссе)	<b>Кр</b>
<b>Форма промежуточной аттестации</b> (КР, КП, зачет, экзамен)	<b>Зачет</b>

#### 4. Содержание дисциплины.

##### 4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, академ. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, академ. 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-1.4
2	Информационные ресурсы публичных и университетских научно-технических библиотек	4	6	-	6	ПК-1	ПК-1.4
3	Электронные справочно-информационные базы данных и знаний по химии и смежным дисциплинам	5	10	-	-	ПК-1	ПК-1.4
4	Традиционные и современные информационные технологии. Методологические основы поиска научно-технической информации	5	16	-	12	ПК-1	ПК-1.4

##### 4.2. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, академ. часы	Инновационная форма
1	Источники научно-технической и патентной информации по химии и химической технологии. 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

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
2	Информационные ресурсы публичных и университетских научно-технических библиотек. Современные электронные библиотеки. Получение доступа к базам данных и электронным версиям периодических изданий ведущих издательств по химии и химической технологии	4	Л, ЛВ
3	Структура, функции и возможности баз данных Chemical Abstracts Service (CAS): REGISTRY, CAPLUS, CASREACT, CHEMLIST, CHEMCATS, CAOLD и др. Поисковый инструмент (машина) SciFinder. Информационная служба Chemical Abstracts Service (CAS). Система регистрации химических соединений в CAS. Информационная система CAS ONLINE.	5	Л, ЛВ
4	Рациональный поиск информации по химии и химической технологии на традиционных (бумажных) носителях. Методологические основы поиска информации по химии и химической технологии с помощью информационных технологий удаленного доступа.	5	Л, ЛВ

### 4.3. Занятия семинарского типа.

#### 4.3.1. Семинары, практические занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Инновационная форма
		всего	в том числе на практическую подготовку	
1	Системы научно-технической информации по химии и химической технологии. Специализированные порталы представления научной информации, поисковые системы поиска научной информации по химии и химической технологии	4	2	АТД, РД

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Инновационная форма
		всего	в том числе на практическую подготовку	
2	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	6	2	Э, Т, АР
3	Электронные справочно информационные базы данных и знаний: ВИНТИ, MEDLINE, PubChem, Cambridge Structural Database, eMolecules, патентные базы данных Роспатент, US Patent and Trademark Office, European Patent Office	10	2	АТД, РД
4	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных CAS	4	2	Т, УИРС, АР
4	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 Analitics)	6	2	Т, УИРС, АР
4	Поиск патентной информации (патентный поиск) в базах данных Роспатента, US Patent and Trademark Office, European Patent Office. Поиск структурной информации в базах данных CSD	6	2	Т, УИРС, АР

#### 4.3.2. Лабораторные работы.

Не предусмотрены.

#### 4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
2	Ресурсы фундаментальной библиотеки СПбГТИ (ТУ)	6	Тематический запрос
4	Поиск химической, структурной и биологической информации с использованием online ресурсов	12	Контрольная работа

#### 4.5. Темы контрольных работ

**Контрольная работа** – Осуществить поиск химической / структурной / биологической информации по лекарственному препарату / исследовательской молекуле / промежуточному продукту с использованием предложенного on-line ресурса в сети Интернет.

#### 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: <https://media.spbti.ru/index.php?lang=ru>

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

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета.

При сдаче зачета, студент получает два вопроса двух видов: теоретический вопрос из перечня вопросов и практическое задание, время подготовки студента к устному ответу – до 30 мин.

Пример варианта вопросов на зачете:

##### Вариант № 1

1. Структура, функции и возможности баз данных.
2. Практическое задание по информационному поиску.

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1

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

## 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:

2. 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.

3. Рудакова, Л. В. Информационные технологии в аналитическом контроле биологически активных веществ / Л. В. Рудакова, О. Б. Рудаков. – 4-е изд., стер. – Санкт-Петербург : Лань, 2023. – 364 с. – ISBN 978-5-507-46588-0. – Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. – URL: <https://e.lanbook.com/book/312914> (дата обращения: 09.12.2024). – Режим доступа : по подписке.

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

Учебный план, РПД и учебно-методические материалы:

<https://media.spbti.ru/index.php?lang=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>

Для расширения знаний по дисциплине рекомендуется использовать следующие универсальные Интернет-ресурсы:

<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.organic-chemistry.org/>

<http://www.chem.sc.edu/faculty/morgan/resources/links.html>  
<http://www.chem.ucla.edu/chempointers.html>  
[www.abc.chemistry.bsu.by](http://www.abc.chemistry.bsu.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>  
<http://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>  
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://wwwcf2.nlm.nih.gov.nlm\\_eresources/eresources/search\\_database.cfm](http://wwwcf2.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/sibstn/databases/medline.htm>  
<http://www.dissert.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>  
<https://spectrabase.com/> Free Spectral Database (сотни тысяч спектров) SpectraBase (Wiley)  
Базы данных ВИНТИ <http://www2.viniti.ru/>  
Термические константы веществ <http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl?show=welcome.html>  
The Merck Index Online<sup>SM</sup> <http://library.dialog.com/bluesheets/html/bl0304.html>  
<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, допуск 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>  
НИИ 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/>  
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)  
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/>  
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/aspentech-hysys.aspx>  
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/>  
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 <https://www.rst.gov.ru/portal/gost>

<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/>

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

Все виды занятий по дисциплине «Основы метода ПЦР» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

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

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

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

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

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:

плановость в организации учебной работы;

серьезное отношение к изучению материала;

постоянный самоконтроль.

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

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

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

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий:

чтение лекций с использованием слайд-презентаций;

взаимодействие с обучающимися посредством ЭИОС.

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

Специальные программные средства и технологии (программные продукты) важнейших информационно-поисковых систем по химии и химической технологии, доступные в режиме online на соответствующих сайтах.

Стандартные программные продукты «Microsoft Office» и бесплатно распространяемые (no fee, free, trial versions) на соответствующих сайтах пакеты программ компьютерной молекулярной графики «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.

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

См. раздел 8.

Консультант-Плюс [www.consultant.ru](http://www.consultant.ru) – справочно-поисковая система.

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

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.

### **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.**

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
ПК-1	Способен проводить сбор научно-технической информации, анализ и обобщение научных данных для планирования и проведения исследований в области медицинской химии	промежуточный

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

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)	
			«зачтено» (пороговый)	«не зачтено»
<b>ПК-1.4</b> Использование фундаментальных знаний в области медицинской химии для планирования и реализации исследовательских и прикладных работ по поиску и разработке новых лекарственных средств	Знает традиционные и современные источники и способы получения информации по химии и химической технологии	Правильные ответы на вопросы №1-15, 17 к зачету	Имеет знание по вопросу, может допускать ошибки в ответах на вопросы, но справляется с ответами с помощью наводящих вопросов	Знание не полное, допускает частые ошибки в ответах на вопросы, не может справиться с ответами даже с помощью наводящих вопросов
	Умеет использовать традиционные и современные информационные технологии для получения научно-технической информации, необходимой для целей профессиональной деятельности	Правильные ответы на вопросы №16-26 к зачету	Реализует умение использования информационных технологий, может допускать ошибки в применении знаний и навыков при реализации умения, но справляется с поставленной задачей с подсказками преподавателя	Реализует слабое умение использования информационных технологий, допускает грубые ошибки в применении знаний и навыков при реализации умения, не справляется с поставленной задачей даже с подсказками преподавателя

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)	
			«зачтено» (пороговый)	«не зачтено»
	Владеет навыками рутинного поиска с помощью традиционных библиотечных поисковых систем и технологий и навыками рационального поиска информации по химии и химической технологии с помощью современных устройств и современных поисковых инструментов, базирующихся на информационных технологиях удаленного доступа к специализированным мировым информационным ресурсам в сети Интернет, а также на новейших библиотечных информационных технологиях	Правильные ответы на вопросы №16, 18-26 к зачету	Владеет навыками поиска, может допускать ошибки в их использовании, но справляется с поставленной задачей с подсказками преподавателя	Владеет слабыми навыками поиска, допускает грубые ошибки в их использовании, не справляется с поставленной задачей даже с подсказками преподавателя

### **3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации.**

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 ВИНИТИ 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 данных базах данных CSD.

26. Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных ВИНИТИ.

При сдаче зачета, студент получает вопрос 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.