

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 30.10.2023 17:06:28
Уникальный программный ключ:
3b89716a1076b80b2c167df02729101782b84



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

« 21 » февраля 2023 г.

Рабочая программа дисциплины
ИНФОРМАТИКА В ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Направление подготовки

04.04.01 Химия

Направленность образовательной программы

Синтетическая органическая химия

Квалификация

Магистр

Форма обучения

Очная

Факультет **химической и биотехнологии**

Кафедра **органической химии**

Санкт-Петербург

2023

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

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

Рабочая программа дисциплины «Б1.В.02» обсуждена на заседании кафедры органической химии
протокол от 23 января 2023 г. № 5

Заведующий кафедрой

М.Л. Петров

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химической и биотехнологии
протокол от 06 февраля 2023 г. № 6

Председатель

М.В. Рутто

СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления подготовки		М.Л. Петров
Директор библиотеки		Т.Н. Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		М.З. Труханович
Начальник УМУ		С.Н. Денисенко

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	04
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы.....	04
3. Объем дисциплины	05
4. Содержание дисциплины	
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	05
4.2. Занятия лекционного типа.....	06
4.3. Занятия семинарского типа.....	07
4.3.1. Семинары, практические занятия	07
4.4. Самостоятельная работа.....	09
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	10
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	10
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	11
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины	11
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	11
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	
10.1. Информационные технологии.....	12
10.2. Программное обеспечение.....	12
10.3. Базы данных и информационные справочные системы.....	12
11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	12
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья	12

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 04.04.01 магистратуры обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине.

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
ПК-2 Способен проводить поиск, анализ и обработку научно-технической информации по заданной тематике исследования в области органической химии и смежных наук	ПК-2.2 Владение навыками поиска и анализа специализированной литературы в области изучения химии и исследования свойств органических соединений с привлечением современных информационных технологий	Знать: основные источники информации в области химии и исследования физико-химических свойств органических соединений; основные подходы к поиску, обработке, анализу и хранению химической информации Уметь: проводить поиск, отбор и анализ научных публикаций в области химии органических соединений с привлечением современных информационных технологий Владеть: навыками работы текстовыми и патентными базами данных (Scopus, Reaxys, SciFinder, CSD и др.), химическими редакторами и ресурсами для прогнозирования физико-химических свойств и биологической активности химических соединений на основании их строения

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы¹.

Дисциплина относится к дисциплинам части, формируемой участниками образовательных отношений (Б1.В.02) и изучается на 1 курсе в 1 семестре.

Полученные в процессе изучения дисциплины «Информатика в органической химии» знания, умения и навыки могут быть использованы при изучении дисциплин «Катализ в органической химии», «Химия гетероциклических соединений», «Химия элементоорганических соединений», «История органической химии», в научно-исследовательской работе и при выполнении выпускной квалификационной работы.

¹ Место дисциплины будет учитываться при заполнении таблицы 1 в Приложении 1 (Фонд оценочных средств)

3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, академических часов
	Очная форма обучения
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов)	3/108
Контактная работа с преподавателем:	60
занятия лекционного типа	16
занятия семинарского типа, в т.ч.	32
семинары, практические занятия (в том числе практическая подготовка)	32 (2)
лабораторные работы	–
курсовое проектирование (КР или КП)	–
КСР	12
другие виды контактной работы	
Самостоятельная работа	48
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе, устный опрос)	устный опрос
Форма промежуточной аттестации (Кр, КП, зачет, экзамен)	зачет

4. Содержание дисциплины.

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, академ. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, академ. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы			
1.	Химическая информация. Типы химической информации.	10	10	–	24	ПК-2	ПК-2.2
2.	Компьютерные представления химических структур	6	22	–	24	ПК-2	ПК-2.2

4.2. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	Химическая информация. Типы и особенности химической информации. Первичные и вторичные источники химической информации	2	ЛВ ²
1	Текстовые базы данных. Google Scholar, Scopus, ScienceDirect, Web of Science	2	ЛВ
1	Патентные базы данных	2	ЛВ
1	Организация обработки, хранения и управления химической информацией (пакет Mendeley)	2	ЛВ
2	Компьютерные представления химических структур. Линейные нотации	2	ЗК
2	Визуализация пространственной структуры молекул. Химические редакторы ACD/ChemSketch, MarvinSketch, Accelrys Draw, ChemDraw	2	МК
2	Прогнозирование физико-химических свойств химических соединений на основании их строения экспериментально-статистическими методами. Пакеты ACD/Labs Freeware, Marvin	2	ЛВ
2	Кембриджская база структурных данных Cambridge Structural Database (CSD)	2	ЛВ

² **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 тренажёров, 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.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Инновационная форма
		всего	в том числе на практическую подготовку*	
1	Первичные и вторичные источники химической информации. Типы публикаций в научных журналах. Структура научной статьи. DOI. Рефераты. Реферативные журналы и базы данных. Справочники и энциклопедии. Научный журнал «Organic Synthesis», серия книг «Organic Reactions», e-EROS: Энциклопедия реагентов для органического синтеза, портал Organic Chemistry Portal	4		КрСт
1	Текстовые базы данных. Google Scholar, Scopus, Science Direct, Web of Science. Классификация баз данных по типу содержимого. Структура базы данных. Синтаксис запроса в текстовых базах данных. Сравнение поисковых систем Google и Google Scholar. Структура и возможности реферативной базы Scopus. Принципы формулировки поисковой задачи. Полнотекстовая база научной периодики Science Direct. Знакомство с мультидисциплинарной реферативной базой Web of Science и ИПС SciFinder. Возможности этих информационных систем. Ресурсы и базы данных ВИНТИ по химии и химической технологии	6	2	МК, МГ
1	Патентные базы данных. Патент как юридический документ. Требования к патенту. Структура патентного документа. База патентов USPTO (US Patent and Trademark Office). Строение, правила поискового запроса и использование. Поисковая патентная система Espacenet (European Patent Office), её структура и функционирование. Патентное ведомство России – Роспатент	4		КрСт

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Инновационная форма
		всего	в том числе на практическую подготовку*	
1	Организация обработки, хранения и управления химической информацией. Mendeleev – бесплатная программа для управления библиографической информацией и персональной научной библиотекой. Интеграция со Scopus и Science Direct. Создание своего профиля в Mendeleev. Знакомство EndNote – коммерческая система управления библиографической информацией	2		МК
2	Компьютерные представления химических структур. Линейные нотации. Различные представления (описания) органической молекулы. Кодированные представления: линейные представления SMILES и InChI; представления в виде молекулярных графов	2		
2	Визуализация пространственной структуры молекул. Химические редакторы ACD/ChemSketch, MarvinSketch, Accelrys Draw, ChemDraw. Внешний вид, строение, инструменты, элементы управления редакторов. Изображение (визуализация) структуры молекул с помощью структурных химических редакторов. Отображение на плоскости молекулярных структур любой сложности, запись уравнения реакции. Сравнение двумерных химических редакторов	4		КтСм
2	Визуализация 3D-структур металлоорганических комплексов. Химический редактор MarvinSketch. Настройка редактора для работы в 3D-пространстве. Выбор многогранника (полиэдра) как основы 3D-изображения комплекса. Алгоритм создания объемной структуры. Построение 3D образов комплексов различной степени сложности	4		КтСм

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Инновационная форма
		всего	в том числе на практическую подготовку*	
2	Прогнозирование физико-химических свойств химических соединений на основании их строения экспериментально-статистическими методами. Пакеты ACD/Labs Freeware, Marvin. Определение расчётных коэффициентов липофильности logP/logD, растворимости в воде, pKa, значений молекулярных рефракций для ряда органических соединений. Сравнение с экспериментальными значениями. Имитация спектров ЯМР ¹ H и ¹³ C органических веществ. Определение расчётных длин и углов между связями органических соединений	2		КтСм
2	Кембриджская база структурных данных Cambridge Structural Database (CSD). Программа поиска информации о кристаллическом и молекулярном строении органических и элементоорганических веществ ConQuest (строение, инструменты, элементы управления). Формулировка запроса поиска (текст, структура). Программа Mercury для визуализации результатов поиска. Определение геометрических параметров структуры вещества (длины связей и валентные углы). Сравнение полученных экспериментальных и расчётных (ACD/Labs) данных.	4		КрСт

4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	Химическая информация. Текстовые базы данных	4	Устный опрос
1	Патентные базы данных	4	Устный опрос
1	Хранения и управления химической информацией (пакет Mendeleev)	4	Устный опрос
2	Компьютерные представления химических структур. Линейные нотации	2	Устный опрос

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
2	Химические редакторы ACD/ChemSketch, MarvinSketch, Accelrys Draw, ChemDraw	6	Устный опрос
2	3D-Структуры металлоорганических комплексов	12	Устный опрос
2	Прогнозирование физико-химических свойств химических соединений. Пакет ACD и Marvin	16	Устный опрос

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

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

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

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

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

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета (1 семестр).

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

Зачет предусматривает выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуется вопросами (заданиями) двух видов: теоретический вопрос (для проверки знаний) и комплексная задача (для проверки умений и навыков). При сдаче зачета, студент получает два вопроса из перечня вопросов и задачу, время подготовки студента к устному ответу - до 30 мин.

Пример варианта вопросов на зачете:

1. Изобразить в 2D-окне редактора (Marvin, ACD) структуру ибупрофена и сделать прогноз растворимости в воде, липофильности и рКа (pK_{BH^+}). Сохранить в формате mol или sk2.
2. Найти название действующего вещества на английском языке и произвести поиск информации по его синтезу или получению с помощью поисковых систем (Google Scholar, ScienceDirect) и реферативных баз данных (Scopus, Web of Science) и патентных баз USPTO (US Patent and Trademark Office), Espacenet [EPO (European Patent Office), Worldwide, WIPO – Espacenet]. Поиск произвести с 1980 по 2022 год.
3. Создать схему реакции этерификации бензойной кислоты этиловым спиртом в редакторе (ACD, Marvin), сохранить и перенести в Word.
4. Нарисовать структуру комплекса цисплатин в 3D форме (Marvin) многогранник (полиэдр).
5. Линейные нотации химических соединений. Определение. Создание SMILES для *n*-крезола.

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1

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. – СПб. : СПбГТИ(ТУ), 2013. – 68 с.

б) электронные учебные издания:

1. Кононова, З. А. Компьютерное моделирование в химии : учебное пособие / З. А. Кононова, С. О. Алтухова. — Липецк : Липецкий ГПУ, 2019. — 145 с. — ISBN 978-5-907168-06-0. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/122414> (дата обращения: 25.12.2022). — Режим доступа: по подписке.

2. Якубик, Д. Г. Химическая информатика : учебное пособие / Д. Г. Якубик. — Кемерово : КемГУ, 2021. — 79 с. — ISBN 978-5-8353-2734-8. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/173539> (дата обращения: 25.12.2022). — Режим доступа: по подписке.

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

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

общие поисковые системы: www.google.ru,

специальные поисковые системы, сайт МГУ им. Ломоносова: <http://www.chem.msu.su/rus/elibrary/>,

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

электронно-библиотечные системы:

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

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

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Все виды занятий по дисциплине «Информатика в органической химии» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

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

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

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

СТП СПбГТИ 016-2014. КС УКВД. Порядок проведения зачетов и экзаменов.

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

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:

плановость в организации учебной работы;

серьезное отношение к изучению материала;

постоянный самоконтроль.

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

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

10.1. Информационные технологии.

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий:

чтение лекций с использованием слайд-презентаций;

построение и визуализация структур органических молекул,

поиск научной информации по органическим соединениям,
моделирование физико-химических и спектральных свойств органических соединений.
взаимодействие с обучающимися с помощью ЭИОС

10.2. Программное обеспечение.

Microsoft Office (Microsoft Excel);

MDL ISIS Draw 2.5 редактор структурных химических формул,

Пакет программ ACD/Lab, ACD/Free 12 редактор структурных химических формул, расчет физико-химических и спектральных свойств органических соединений,
информационная научная база данных по химическим соединениям www.reaxys.com.

10.3. Базы данных и информационные системы

Справочно-поисковая система "Chemnet", химического факультета Московского Государственного университета. www.chem.msu.ru/rus/elibrary/

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

Для ведения лекционных и практических занятий используется большая химическая аудитория 163.7 кв.м. Ноутбук Toshiba L40, мультимедийный проектор Benq MP 511+, экран. Компьютерный класс 50 кв.м., оборудованный персональными компьютерами, объединенными в сеть ПК 8 шт.

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

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

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

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Компетенции		
Индекс	Формулировка³	Этап формирования⁴
ПК-2	Способен проводить поиск, анализ и обработку научно-технической информации по заданной тематике исследования в области органической химии и смежных наук	начальный

³ **жирным шрифтом** выделена та часть компетенции, которая формируется в ходе изучения данной дисциплины (если компетенция осваивается полностью, то фрагменты)

⁴ 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-2.2 Владение навыками поиска и анализа специализированной литературы в области изучения химии и исследования свойств органических соединений с привлечением современных информационных технологий	Знает программные комплексы по визуализации структур молекул. Знает методы текстового и структурного поиска химической информации.	Правильные ответы на вопросы №1–37 к зачёту	Перечисляет некоторые программные комплексы по визуализации структур молекул, но с ошибками. Знает <i>некоторые</i> электронные базы данных, источники справочной и монографической литературы в области органической химии с ошибками	Перечисляет все программные комплексы по визуализации структур молекул, но с небольшими ошибками. Знает электронные базы данных, источники справочной и монографической литературы в области органической химии, но с ошибками	Перечисляет все программные комплексы по визуализации структур молекул. Знает электронные базы данных, источники справочной и монографической литературы в области органической химии
	Умеет оценивать свойства химического объекта исследования, умеет выбирать наиболее эффективные пути поиска химической информации и оптимальные программные комплексы для решения поставленной задачи	Правильные ответы на вопросы № 1–37 к зачету	Умеет приблизительно выбирать пути поиска химической информации и программные комплексы для решения поставленной задачи с ошибками	Умеет выбирать пути поиска химической информации и программные комплексы для решения поставленной задачи с небольшими подсказками преподавателя	Умеет выбирать наиболее эффективные пути поиска химической информации и оптимальные программные комплексы для решения поставленной задачи

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
	Владеет способностью выбирать наиболее эффективные пути поиска химической информации и оптимальные программные комплексы для решения поставленной задачи	Правильные ответы на вопросы № 1–37 к зачету	Отвечает на вопросы с ошибками с подсказками преподавателя	Отвечает на вопросы с небольшими ошибками	Отвечает на вопросы без ошибок и без подсказки преподавателя.

3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации.

3.1. Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-2:

1. Особенности поиска информации в Google Scholar.
2. Отличия и преимущества научного поиска в поисковой системе Google Scholar по отношению к поисковой системе Yandex.
3. Выполнение поиска химической информации (физико-химические характеристики, методы синтеза и данные о реакционной способности) о конкретном веществе.
4. Реферативный журнал "Химия" (РЖ Химия). Выполнение поиска конкретной химической информации в электронном варианте РЖ Химия.
5. Реферативный журнал Chemical Abstract.
6. Представление в электронном виде (программа SciFinder).
7. Какие базы данных представлены в SciFinder?
8. Реферативная база данных Scopus.
9. Какое количество наименований журналов включено в Scopus?
10. Есть ли патенты в Scopus?
11. Варианты поиска.
12. Логические операторы.
13. Выполнение поиска по заданной теме (ключевые слова).
14. Экспорт информации. Программа управления документами Mendeley.
15. База данных Reaxys.
16. Какие базы данных входят в Reaxys?
17. Патентные базы данных.
18. Какова процедура патентования?
19. Время действия патента.
20. Правовой статус патента.
21. Международная классификация изобретений. Патентное семейство.
22. Выполнение поиска патентов по заданной теме.
23. Редактирование структурных химических формул в программе Accelrys Draw.
24. Химические структурные редакторы для операционных систем Windows.
25. Химический редактор MarvinSketch.
26. Редактирование структурных химических формул молекулы с использованием пакета программ Accelrys Draw.
27. Визуализация структуры молекулы с использованием пакета программ Marvin.
28. Пакет программ ACD/Lab, ACD/FreeWare.
29. Химическая информация.
30. Типы и закономерности химической информации.
31. Базы данных химической информации.
32. Информационная научная база данных по органическим соединениям Beilstein.
33. Информационная научная база данных по неорганическим и металлоорганическим соединениям Gmelin Database.
34. Информационная научная база данных по органическим соединениям online Интернет программа Reaxys (Elsevier).
35. Прогнозирование физико-химических свойств химических соединений на основании их строения экспериментально-статистическими методами ACD/Lab.
36. Прогнозирование биологических свойств соединений на основании их строения экспериментально-статистическими методами.
37. Исследование структуры и реакционной способности молекул методами компьютерной химии.

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

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

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

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