

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович  
Должность: Проректор по учебной и методической работе  
Дата подписания: 13.03.2024 13:35:01  
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  
«\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2023 г.

**Рабочая программа дисциплины**  
**ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ В ХИМИИ**

Специальность

**04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия**

Специализация

**Химия материалов**

Квалификация

**Химик. Преподаватель химии**

Форма обучения

**Очная**

**Факультет химии веществ и материалов**

**Кафедра физико-химического конструирования функциональных материалов**

Санкт-Петербург

2023

**Б1.О.26**

## **ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ**

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы .....	04
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы.....	05
3. Объем дисциплины .....	05
4. Содержание дисциплины.....	06
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	06
4.2. Формирование индикаторов достижения компетенций разделами дисциплины...	06
4.3. Занятия лекционного типа.....	07
4.4. Занятия семинарского типа.....	08
4.4.1. Семинары, практические занятия .....	08
4.4.2. Лабораторные занятия.....	09
4.5. Самостоятельная работа обучающихся .....	09
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине .....	09
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации .....	09
7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины .....	10
8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.....	10
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины .....	11
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.....	11
10.1. Информационные технологии.....	11
10.2. Программное обеспечение.....	11
10.3. Базы данных и информационные справочные системы.....	12
11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы .....	12
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья .....	12
Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации...	13

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

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

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
<b>ОПК-3</b> Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения	<b>ОПК-3.3</b> Использование стандартного программного обеспечения и специализированных баз данных при решении задач профессиональной деятельности	<b>Знать:</b> основные приемы работы со специализированным программным обеспечением при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных (ЗН-1); <b>Уметь:</b> применять специализированное программное обеспечение при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных (У-1); <b>Владеть:</b> навыками применения специализированного программного обеспечения и баз данных при решении задач профессиональной сферы деятельности (Н-1).

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина относится к дисциплинам обязательной части (Б1.О.26), и изучается на 5 курсе в 9 семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «Физические методы анализа» и «Термодинамические расчеты в химии».

Полученные в процессе изучения дисциплины «Информационно-аналитические системы в химии» знания, умения и навыки могут быть использованы в научно-исследовательской работе, 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>3/ 108</b>
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>80</b>
занятия лекционного типа	36
занятия семинарского типа, в т.ч.	36
семинары, практические занятия	36
лабораторные работы	-
курсовое проектирование (КР или КП)	-
КСР	8
другие виды контактной работы	-
<b>Самостоятельная работа</b>	<b>28</b>
<b>Форма текущего контроля</b> (Кр, реферат, РГР, эссе)	-
<b>Форма промежуточной аттестации</b> (КР, КП, зачет, экзамен)	<b>Зачёт</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	Лабораторные работы			
1	Введение в хемоинформатику. Информационно-аналитическая система.	6	-	-	-	ОПК-3	ОПК-3.3
2	Компьютерное представление химических структур.	6	8	-	6	ОПК-3	ОПК-3.3
3	Кристаллографические базы данных.	6	8	-	8	ОПК-3	ОПК-3.3
4	Визуализация результатов экспериментальной работы.	6	8	-	6	ОПК-3	ОПК-3.3
5	Химические базы данных.	6	4	-	8	ОПК-3	ОПК-3.3
6	Химические ресурсы интернета.	6	8	-	-	ОПК-3	ОПК-3.3

##### 4.2. Формирование индикаторов достижения компетенций разделами дисциплины

№ п/п	Код индикаторов достижения компетенции	Наименование раздела дисциплины
1	ОПК-3.3	Роль компьютерных технологий в развитии химии. Информационно-аналитическая система. Компьютерное представление химических структур. Способы представления химических реакций. Кристаллографические базы данных. Работа в базе данных COD. Работа с CIF. Визуализация результатов экспериментальной работы. Графики, их элементы. Способы обработки числовых данных. Аппроксимация. Химические базы данных. Химические ресурсы Интернета.

### 4.3. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	<p><b>Введение в хемоинформатику. Информационно-аналитическая система.</b>                      Основные направления применения компьютеров в химии. Роль компьютерных технологий в развитии химии. Актуальные проблемы и задачи вычислительных систем в химии.</p>	6	ЛВ
2	<p><b>Компьютерное представление химических структур.</b>                      Линейные представления, графовые и матричные представления, таблицы связности. Способы представления химических реакций. Знакомство с молекулярными редакторами ChemDraw, ChemSketch и BioVIA Draw. Математическое моделирование свойств на основе структуры вещества. Расчетные и экспериментальные ИК – спектры.</p>	6	ЛВ
3	<p><b>Кристаллографические базы данных.</b>                      Работа в базе данных COD. Работа с CIF файлами в программе Vesta. Межатомные расстояния. Расчетные и экспериментальные дифрактограммы.</p>	6	ЛВ
4	<p><b>Визуализация результатов экспериментальной работы.</b>                      Графики, их элементы. Общие принципы построения графиков. Построение графиков в пакете Origin 8.6 Pro или MS Excel. Обработка экспериментальных данных. Способы обработки числовых данных. Аппроксимация. Метод наименьших квадратов, логнормальное и нормальное распределения. Линейные и нелинейные зависимости.</p>	6	ЛВ
5	<p><b>Химические базы данных.</b>                      Типы баз данных: иерархические, сетевые, реляционные. Принципы отношения между таблицами. Нормализация базы данных. Специфика химических баз данных.</p>	6	ЛВ

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
6	<b>Химические ресурсы Интернета.</b> Универсальные поисковые средства: Google, Yandex, Yahoo. Словари, энциклопедии, переводчики текстов. Специализированные поисковые средства: Scirus, Scopus. Основные правила формулирования поискового задания. Тематические каталоги и метасайты. Специализированные химические метасайты. Поиск химической информации: свойства веществ, методы синтеза, поставщики химических реактивов, учебная и научная литература, химические журналы и патенты.	6	ЛВ

#### 4.4. Занятия семинарского типа.

##### 4.4.1. Семинары, практические занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
2	<b>Занятие 1.</b> Изображение молекулярных структур в химическом редакторе ChemSketch. Изображение синтетических установок и расчёт синтеза в химическом редакторе ChemSketch. Графические и текстовые средства редактора: изображение графиков, создание таблиц, презентаций.	8	АТД
3	<b>Занятие 2.</b> Визуализация элементарной ячейки в программе Vesta. Определение координаций атомов и межатомных расстояний. Расчет дифрактограмм.	8	АТД
4	<b>Занятие 3.</b> Обработка числовых экспериментальных данных в программе Origin 8.6 Pro или MS Excel.	8	АТД
5	<b>Занятие 4.</b> Создание базы данных и её заполнение в программном пакете ChemDBSoft Demo.	4	АТД
6	<b>Занятие 5.</b> Поиск химической информации.	8	АТД

#### 4.4.2. Лабораторные работы

Лабораторные работы в учебном плане не предусмотрены.

#### 4.5. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
2	<b>Тема 2. Компьютерное представление химических структур.</b> Построение химической структуры в программе ChemSketch.	6	Устный или письменный опрос
3	<b>Тема 3. Кристаллографические базы данных.</b> Работа с файлами CIF, визуализация элементарной ячейки в программе Vesta.	8	Устный или письменный опрос
4	<b>Тема 4. Визуализация результатов экспериментальной работы.</b> Обработка числовых данных, построение и анализ графика в программе Origin 8.6 Pro или MS Excel.	6	Устный или письменный опрос
5	<b>Тема 5. Химические базы данных.</b> Создание базы данных и её заполнение в программном пакете ChemDBSoft_Demo.	8	Устный или письменный 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: <https://media.technolog.edu.ru>

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

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачёта.

Зачёт предусматривает выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуются теоретическими вопросами (заданиями).

При сдаче зачёта студент получает два вопроса из перечня вопросов, время подготовки студента к устному ответу - до 45 мин.

Пример варианта вопросов на зачёте:

##### Вариант № 1

1. Программы для обработки экспериментальных данных. Аппроксимация.
2. Поиск химической информации в Интернете. Формирование запроса, поиск свойств соединения, методов его получения, поиск реакций.

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 – «зачёт».

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

### а) печатные издания:

1. Бутырская, Е. В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView / Е. В. Бутырская - Москва: СОЛОН-Пресс, 2011. - 218 с. - ISBN 978-5- 91359-095-4.
2. Чистякова, Т. Б. Применение универсальных моделирующих программ для синтеза и анализа технологических процессов: Учебное пособие / Т. Б. Чистякова, Л. В. Гольцева, А. В. Козлов ; СПбГТИ(ТУ). Каф. систем автоматизир. проектирования и упр. - СПб. : [б. и.], 2011. - 65 с.
3. Русинов, А. В. Организация поиска научно-технической информации в области химической и биотехнологии : учебное пособие / А. В. Русинов ; СПбГТИ(ТУ). Каф. молекуляр. биотехнологии. - СПб. : [б. и.], 2019. - 36 с.
4. Масленников, И. Г. Примеры применения пакета Mathcad в химико-технологических расчетах : Учебное пособие / И. Г. Масленников, К. И. Еремин ; СПбГТИ(ТУ). Каф. химии и технологии синтез. биологически активных веществ. - 2-е изд., перераб. и доп. - СПб. : [б. и.], 2008. - 50 с.

### б) электронные учебные издания:

1. Рудакова, Л. В. Информационные технологии в аналитическом контроле биологически активных веществ : Монография / Л. В. Рудакова, О. Б. Рудаков. - 2-е изд., испр. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2022. - 360 с. - ISBN 978-5-8114-1870-1 : // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 16.05.2023). - Режим доступа: по подписке.
2. Удалов, Ю. П. Проектирование наноструктурированных керамических материалов с применением вычислительных комплексов : методические указания к учебной дисциплине "Методологические основы проектирования наноструктурированных керамических материалов" / Ю. П. Удалов ; СПбГТИ(ТУ). Каф. хим. технологии тонкой техн. керамики. - СПб. : [б. и.], 2013. - 124 с. // СПбГТИ. Электронная библиотека. - URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 16.05.2023). - Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

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

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

С компьютеров института открыт доступ к:  
<http://media.technolog.edu.ru> Учебный план, РПД и учебно-методические материалы.

Электронно-библиотечные системы:

<https://technolog.bibliotech.ru> «Электронный читальный зал – БиблиоТех»;  
<http://e.lanbook.com> - Электронно-библиотечная система издательства «Лань», коллекции «Химия» (книги издательств «Лань», «Бином»), «Нанотехнологии» (книги издательства «Бином. Лаборатория знаний»);

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

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

<http://webofknowledge.com> - Универсальная реферативная база данных научных публикаций Web of Science компании Thomson Reuters;

<http://iopscience.iop.org/journals?type=archive>, <http://iopscience.iop.org/page/subjects> -  
Издательство IOP (Великобритания);  
[www.oxfordjournals.org](http://www.oxfordjournals.org) - Архив научных журналов издательства Oxford University Press;  
<http://www.sciencemag.org/> - Полнотекстовый доступ к журналу Science (The American Association for the Advancement of Science (AAAS));  
<http://www.nature.com> - Доступ к журналу Nature (Nature Publishing Group);  
<http://pubs.acs.org> - Доступ к коллекции журналов Core + издательства American Chemical Society;  
<http://journals.cambridge.org> - Полнотекстовый доступ к коллекции журналов Cambridge University Press.  
  
[www.european-patent-office.org](http://www.european-patent-office.org) - Европейское патентное ведомство (ЕПВ)  
[www.ibm.com/patents](http://www.ibm.com/patents) - Патентный сервер IBM  
[www.piperpat.co.nz/index.html](http://www.piperpat.co.nz/index.html) - Pipers (Список ресурсов по патентам)  
[www.sciweb.com](http://www.sciweb.com) - SciWeb  
[www.micropatent.com](http://www.micropatent.com) - MicroPatent  
<http://www.fips.ru/> - РОСПАТЕНТ

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

Все виды занятий по дисциплине «Информационно-аналитические системы в 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 УКДВ. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению.

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

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

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:

- плановость в организации учебной работы;
- серьезное отношение к изучению материала;
- постоянный самоконтроль.

На занятия студент должен приходить, имея 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.**

Microsoft Office (Microsoft Excel).

Программа Vesta (для графического представления атомных структур неорганических веществ) – в свободном доступе.

Химическом редактор ChemSketch (для графического представления молекулярных единиц) – в свободном доступе.

Программа Origin 8.6 Pro Demo (для обработки и визуализации числовых данных) – в свободном доступе.

Программа ChemDBSoft\_Demo (для создания химических баз данных) – в свободном доступе.

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

База данных журналов РИНЦ.

База данных COD, Mincrust, ИВТАНТЕРМО, pubchem, Chemical Synthesis Database, HSC, chemspider.

## **11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы<sup>1</sup>.**

**Учебная аудитория для проведения лекционных занятий**, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Основное оборудование: столы; стулья; доска; демонстрационный экран, проектор, компьютер.

**Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа.**

Основное оборудование: столы; стулья; доска; демонстрационный экран; проектор; компьютеры.

**Помещение для самостоятельной работы.**

Основное оборудование: столы; стулья; проектор; экран; компьютеры с доступом к информационно-телекоммуникационной сети «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.

---

<sup>1</sup> В разделе отображается состав помещений, которые представляют собой учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных образовательной программой по дисциплине, оснащенные оборудованием и техническими средствами обучения.

**Фонд оценочных средств  
для проведения промежуточной аттестации по  
дисциплине «Информационно-аналитические системы в химии»**

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

Индекс компетенции	Содержание <sup>2</sup>	Этап формирования <sup>3</sup>
ОПК-3	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения	промежуточный

<sup>2</sup> **Жирным шрифтом** выделяется та часть компетенции, которая формируется в ходе изучения данной дисциплины (если компетенция осваивается полностью, то фрагменты не выделяются).

<sup>3</sup> 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)
			«зачтено» (пороговый)
<b>ОПК-3.3</b> Использование стандартного программного обеспечения и специализированных баз данных при решении задач профессиональной деятельности	<b>Перечисляет</b> стандартное ПО для решения задач химической направленности, <b>правильно выбирает</b> подходящее ПО для конкретной задачи, <b>демонстрирует владение</b> базовыми навыками работы со стандартным ПО.	Правильные ответы на вопросы №1-5 к зачёту	Перечисляет стандартное ПО для решения задач химической направленности, правильно выбирает подходящее ПО для конкретной задачи, демонстрирует владение базовыми навыками работы со стандартным ПО. Может применить эти знания для решения своих научно-исследовательских задач.
	<b>Перечисляет</b> типы химических баз данных, <b>демонстрирует</b> навыки анализа и работы с базами данных, <b>поясняет</b> алгоритмы работы с базами данных, <b>показывает</b> умения находить, собирать и систематизировать информацию в химических базах данных	Правильные ответы на вопросы №6-8 к зачёту	Уверенно и без ошибок перечисляет типы химических баз данных, демонстрирует навыки анализа и работы с базами данных, поясняет алгоритмы работы с базами данных, показывает умения находить, собирать и систематизировать информацию в химических базах данных сравнивает и анализирует.
	<b>Демонстрирует</b> навыки обработки экспериментальных данных с использованием стандартного ПО, <b>объясняет</b> алгоритмы обработки числовых данных и построения графиков, <b>демонстрирует</b> навыки, необходимые для осуществления аппроксимации данных	Правильные ответы на вопросы №9-11 к зачёту	Уверенно и без ошибок поясняет связь демонстрирует навыки обработки экспериментальных данных с использованием стандартного ПО, объясняет алгоритмы обработки числовых данных и построения графиков, демонстрирует навыки, необходимые для осуществления аппроксимации данных

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)
			«зачтено» (пороговый)
	<p><b>Демонстрирует</b> навыки поиска и анализа научной литературы по теме реферата, <b>показывает</b> умения готовить графические материалы с использованием современных технологий и ПО по выбранной теме реферата, <b>отвечает на дополнительные вопросы</b> по теме реферата (тип используемой химической базы данных, программы для подготовки иллюстраций)</p>	<p>Правильные ответы на вопросы №12-17 к зачёту</p>	<p>Демонстрирует навыки поиска и анализа научной литературы по теме реферата, показывает умения готовить графические материалы с использованием современных технологий и ПО по выбранной теме реферата, отвечает на дополнительные вопросы по теме реферата (тип используемой химической базы данных, программы для подготовки иллюстраций). Может применить эти знания для решения своих научно-исследовательских задач.</p>

**3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации**  
**Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ОПК-3:**

1. Основные направления применения компьютеров в химии. Роль компьютерных технологий в развитии химии.
2. Программные пакеты, используемые в химии. Лицензионные и общедоступные программы. Программы редакторские, поисковые, расчетные.
3. Использование компьютеров для ведения химической документации. Общая характеристика химических структурно-графических редакторов. Редактор ChemSketch.
4. Работа в химическом редакторе ChemSketch. Режимы работы, основные средства изображения и анализа химических структур. Виды графической и текстовой информации, создаваемой в редакторе.
5. Программы для обработки экспериментальных данных. Аппроксимация.
6. Типы баз данных: иерархические, сетевые, реляционные. Записи, поля, индексы, ключи. Оптимизация хранения информации в базе.
7. Нормализация базы данных. Нормальные формы реляционных баз данных.
8. Основные этапы создания химической базы данных с помощью ChemDBsoft.
9. Принцип работы метода наименьших квадратов. Что такое  $R^2$  и для чего он используется при аппроксимации?
10. В чем разница между аргументами функции и ее параметрами? Что такое аппроксимация? Каким должно быть количество исходных данных для корректной аппроксимации?
11. Алгоритм обработки числовых экспериментальных данных. Линейные и нелинейные зависимости.
12. Химические ресурсы в Интернете. Универсальные и специализированные поисковые средства. Основные химические сайты.
13. Поиск химической информации: свойства веществ, методы синтеза, поставщики химических реактивов, учебная и научная литература, химические журналы и патенты.
14. Поиск химической информации в Интернете. Формирование запроса, поиск свойств соединения, методов его получения, поиск реакций.
15. Поиск первичной химической информации в Интернете. Статьи и патенты. Каталоги журналов свободного доступа.
16. Поиск патентной информации. Патенты РФ, США и Евросоюза.
17. Алгоритм поиска химической информации для написания обзора литературы для курсовой работы, дипломной работы, статьи в химический журнал.

При сдаче зачёта студент получает два вопроса из перечня, приведенного выше.  
Время подготовки студента к устному ответу на вопросы - до 45 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 СПбГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКДВ Порядок проведения зачетов и экзаменов.

По дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме зачета, шкала оценивания – «зачтено» (если достигнут «пороговый» уровень освоения всех элементов компетенции), «не зачтено».