

**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**

**Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования "Пермский  
государственный национальный исследовательский  
университет"**

**Кафедра аналитической химии и экспертизы**

Авторы-составители: **Васянин Александр Николаевич**

Рабочая программа дисциплины

**ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ХИМИИ**

Код УМК 50675

Утверждено  
Протокол №1  
от «01» сентября 2020 г.

Пермь, 2020

## **1. Наименование дисциплины**

Информационные технологии в химии

## **2. Место дисциплины в структуре образовательной программы**

Дисциплина входит в вариативную часть Блока « Б.1 » образовательной программы по направлениям подготовки (специальностям):

Направление: **04.03.01** Химия

направленность Программа широкого профиля

### **3. Планируемые результаты обучения по дисциплине**

В результате освоения дисциплины **Информационные технологии в химии** у обучающегося должны быть сформированы следующие компетенции:

**04.03.01** Химия (направленность : Программа широкого профиля)

**ОПК.3** способность осваивать новые технологии и применять их для проведения естественнонаучных исследований

**ОПК.8** способность решать задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом основных требований информационной безопасности

**ПК.5** способность получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий

#### 4. Объем и содержание дисциплины

<b>Направления подготовки</b>	04.03.01 Химия (направленность: Программа широкого профиля)
<b>форма обучения</b>	очная
<b>№№ триместров, выделенных для изучения дисциплины</b>	9
<b>Объем дисциплины (з.е.)</b>	2
<b>Объем дисциплины (ак.час.)</b>	72
<b>Контактная работа с преподавателем (ак.час.), в том числе:</b>	28
<b>Проведение лекционных занятий</b>	14
<b>Проведение практических занятий, семинаров</b>	14
<b>Проведение лабораторных работ, занятий по иностранному языку</b>	0
<b>Самостоятельная работа (ак.час.)</b>	44
<b>Формы текущего контроля</b>	Защищаемое контрольное мероприятие (1) Письменное контрольное мероприятие (2)
<b>Формы промежуточной аттестации</b>	Зачет (9 триместр)

## 5. Аннотированное описание содержания разделов и тем дисциплины

### **Расчетная и математическая химия**

Информационные технологии в решении расчетных задач химии. Типы химических расчетных задач. ПО для расчетов

### **Компьютерное моделирование в химии**

Общие сведения о способах расчетов молекулярных структур и их свойств в химии. Неэмпирические (ab initio) и полуэмпирические способы расчетов. Специализированное ПО для расчетов и его особенности

### **Расчетные задачи, не связанные с молекулярным моделированием**

Различные типы расчетных задач в химии и способы их решения. Специализированное ПО для работы с научной графикой

### **Системы компьютерной алгебры (CAS) и численных расчетов в химии**

Системы компьютерной алгебры. Возможности для моделирования в химии. Решение некоторых типов расчетных задач

### **Химическая информация и работа с ней**

Общее представление о химической информации, методах ее получения и обработки. Задачи обработки химической информации. Подходы к описанию связей "структура-свойства" (QSAR).

### **Молекулярный граф и структура химического соединения**

Структура молекулы и ее отображение на молекулярный граф. Способы записи графа: матрица смежности. Преобразование структуры молекулы в матрицу смежности и обратно.

### **Поиск химической информации в базах данных. Язык запросов SMARTS**

Поиск структур химических соединений в базах данных. Язык описания шаблонов для поиска SMARTS. Нечеткий поиск похожих структур

### **Способы кодирования структуры: форматы SMILES, InChI**

Общая информация о способах кодирования структуры молекул. Запись структуры молекулы с помощью языка SMILES. Основные правила языка.

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

Освоение дисциплины требует систематического изучения всех тем в той последовательности, в какой они указаны в рабочей программе.

Основными видами учебной работы являются аудиторские занятия. Их цель - расширить базовые знания обучающихся по осваиваемой дисциплине и систему теоретических ориентиров для последующего более глубокого освоения программного материала в ходе самостоятельной работы. Обучающемуся важно помнить, что контактная работа с преподавателем эффективно помогает ему овладеть программным материалом благодаря расстановке необходимых акцентов и удержанию внимания интонационными модуляциями голоса, а также подключением аудио-визуального механизма восприятия информации.

Самостоятельная работа преследует следующие цели:

- закрепление и совершенствование теоретических знаний, полученных на лекционных занятиях;
- формирование навыков подготовки текстовой составляющей информации учебного и научного назначения для размещения в различных информационных системах;
- совершенствование навыков поиска научных публикаций и образовательных ресурсов, размещенных в сети Интернет;
- самоконтроль освоения программного материала.

Обучающемуся необходимо помнить, что результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем во время проведения мероприятий текущего контроля и учитываются при промежуточной аттестации.

Обучающимся с ОВЗ и инвалидов предоставляется возможность выбора форм проведения мероприятий текущего контроля, альтернативных формам, предусмотренным рабочей программой дисциплины. Предусматривается возможность увеличения в пределах 1 академического часа времени, отводимого на выполнение контрольных мероприятий.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации.

При проведении текущего контроля применяются оценочные средства, обеспечивающие передачу информации, от обучающегося к преподавателю, с учетом психофизиологических особенностей здоровья обучающихся.

## **7. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине**

При самостоятельной работе обучающимся следует использовать:

- конспекты лекций;
- литературу из перечня основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля);
- текст лекций на электронных носителях;
- ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимые для освоения дисциплины;
- лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение из перечня информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине;
- методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

## 8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

### Основная:

1. Паничев, С. А. Математические модели в естественных науках: химия : учебное пособие для вузов / С. А. Паничев, Л. П. Паничева, С. С. Волкова. — 2-е изд. — Москва : Издательство Юрайт, 2019 ; Тюмень : Издательство Тюменского государственного университета. — 265 с. — (Университеты России). — ISBN 978-5-534-11297-9 (Издательство Юрайт). — ISBN 978-5-400-01222-8 (Издательство Тюменского государственного университета). — Текст : электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. <https://www.urait.ru/bcode/444861>
2. Химические приложения топологии и теории графов/ред. Р. Кинг.-Москва:Мир,1987.-560.-Библиогр. в конце разд., Предм. указ.: с. 544-551

### Дополнительная:

1. Соловьев М. Е., Соловьев М. М. Компьютерная химия/М. Е. Соловьев, М. М. Соловьев.-М.:СОЛОН-Пресс,2005, ISBN 5-98003-188-X.-536.-Библиогр.: с. 528-532
2. Уроки работы в системе МАТНЕМАТИСА:[метод. указ.]/М-во образования и науки РФ, Перм. гос. ун-т; [сост.: Т. В. Норина].-Пермь:ПГУ,2005.-67.
3. Дьяконов, В. П. Mathematica 5.1/5.2/6 в математических и научно-технических расчетах / В. П. Дьяконов. — 2-е изд. — Москва : СОЛОН-ПРЕСС, 2017. — 744 с. — ISBN 978-5-91359-045-9. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. <http://www.iprbookshop.ru/90395>
4. Скатецкий В. Г., Свиридов Д. В., Яшкин В. И. Математические методы в химии: учебное пособие для вузов/В. Г. Скатецкий, Д. В. Свиридов, В. И. Яшкин.-Минск:ТетраСистемс,2006, ISBN 985-470-434-3.-368.-Библиогр.: с. 365

## **9. Перечень ресурсов сети Интернет, необходимых для освоения дисциплины**

При освоении дисциплины использование ресурсов сети Интернет не предусмотрено.

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

Образовательный процесс по дисциплине **Информационные технологии в химии** предполагает использование следующего программного обеспечения и информационных справочных систем:

- презентационные материалы (слайды по темам лекционных и практических занятий);
- доступ в режиме on-line в Электронную библиотечную систему (ЭБС)
- доступ в электронную информационно-образовательную среду университета.

При освоении материала и выполнения заданий по дисциплине рекомендуется использование материалов, размещенных в Личных кабинетах обучающихся ЕТИС ПГНИУ (**student.psu.ru**).

При организации дистанционной работы и проведении занятий в режиме онлайн могут использоваться:

- система видеоконференцсвязи на основе платформы BigBlueButton (<https://bigbluebutton.org/>).
- система LMS Moodle (<http://e-learn.psu.ru/>), которая поддерживает возможность использования текстовых материалов и презентаций, аудио- и видеоконтент, а так же тесты, проверяемые задания, задания для совместной работы.
- система тестирования Indigo (<https://indigotech.ru/>).

## **11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине**

1. Лекционные занятия: аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой (и) или маркерной доской.
2. Практические занятия и текущий контроль: компьютерный класс, оснащенный персональными ЭВМ и соответствующим программным обеспечением. Состав оборудования определен в Паспорте компьютерного класса.
3. Групповые (индивидуальные) консультации: аудитория, оснащенная меловой (и) или маркерной доской.
4. Самостоятельная работа: помещения Научной библиотеки ПГНИУ.  
Помещения научной библиотеки ПГНИУ для обеспечения самостоятельной работы обучающихся:
  1. Научно-библиографический отдел, корп.1, ауд. 142. Оборудован 3 персональными компьютера с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.
  2. Читальный зал гуманитарной литературы, корп. 2, ауд. 418. Оборудован 7 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.
  3. Читальный зал естественной литературы, корп.6, ауд. 107а. Оборудован 5 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.
  4. Отдел иностранной литературы, корп.2 ауд. 207. Оборудован 1 персональным компьютером с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.
  5. Библиотека юридического факультета, корп.9, ауд. 4. Оборудована 11 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.
  6. Читальный зал географического факультета, корп.8, ауд. 419. Оборудован 6 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.Все компьютеры, установленные в помещениях научной библиотеки, оснащены следующим



программным обеспечением:

Операционная система ALT Linux;

Офисный пакет Libreoffice.

Справочно-правовая система «КонсультантПлюс»

**Фонды оценочных средств для аттестации по дисциплине  
Информационные технологии в химии**

**Планируемые результаты обучения по дисциплине для формирования компетенции и  
критерии их оценивания**

Компетенция	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
<p><b>ОПК.3</b> способность осваивать новые технологии и применять их для проведения естественнонаучных исследований</p>	<p><b>ЗНАТЬ:</b> основные методы кодирования химической информации <b>УМЕТЬ:</b> применять эти методы на практике <b>ВЛАДЕТЬ:</b> способностью интерпретировать полученные результаты</p>	<p align="center"><b>Неудовлетворител</b></p> <p>Отсутствие знаний Не знает основ дисциплины, необходимых при формировании компетенции Отсутствие умений Отсутствие навыков</p> <p align="center"><b>Удовлетворительн</b></p> <p>Общие, но не структурированные знания основ кодирования химической информации; знает основные понятия, терминологию Частично сформированные умения применять на практике кодирование химической информации, производить поиск по химическим структурам в базах данных Способен интерпретировать полученные результаты с минимальными ошибками</p> <p align="center"><b>Хорошо</b></p> <p>Сформированные, но содержащие отдельные пробелы систематические знания основ кодирования химической информации; знает основные понятия, терминологию В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы сформированные умения применять на практике кодирование химической информации, производить поиск по химическим структурам в базах данных Способен интерпретировать полученные результаты с минимальными ошибками</p> <p align="center"><b>Отлично</b></p> <p>Сформированные систематические знания основ кодирования химической информации; знает основные понятия, терминологию Сформированные умения применять на практике кодирование химической информации, производить поиск по</p>

Компетенция	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
		<p align="center"><b>Отлично</b></p> <p>химическим структурам в базах данных Безошибочно интерпретирует полученные результаты</p>
<p><b>ПК.5</b> способность получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий</p>	<p><b>ЗНАТЬ:</b> программы для работы с химической информацией (ACD Labs ChemSketch, веб-приложения PubChem, Chemicalize, ChemSpider) <b>УМЕТЬ:</b> применять программы для работы с химической информацией <b>ВЛАДЕТЬ:</b> способностью интерпретировать полученные результаты</p>	<p align="center"><b>Неудовлетворител</b></p> <p>Отсутствие знаний Не знает основ дисциплины, необходимых при формировании компетенции Отсутствие умений Отсутствие навыков</p> <p align="center"><b>Удовлетворительн</b></p> <p>Знает программы для обработки химической информации, некоторые их особенности. С помощью преподавателя умеет применять их на практике. С помощью преподавателя интерпретирует полученные результаты</p> <p align="center"><b>Хорошо</b></p> <p>Знает программы для обработки химической информации, их особенности. В целом успешно умеет применять их на практике. С минимальными ошибками интерпретирует полученные результаты</p> <p align="center"><b>Отлично</b></p> <p>Знает программы для обработки химической информации, их особенности. Умеет успешно применять их на практике. Безошибочно интерпретирует полученные результаты</p>
<p><b>ОПК.8</b> способность решать задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом основных требований</p>	<p><b>ЗНАЕТ:</b> наиболее популярные базы данных химических соединений <b>УМЕЕТ:</b> искать структуры в базах данных <b>ВЛАДЕЕТ:</b> навыками безопасной работы с базами данных химических соединений</p>	<p align="center"><b>Неудовлетворител</b></p> <p>Не знает наиболее популярные базы данных химических соединений Не умеет искать структуры в базах данных Не владеет навыками безопасной работы с базами данных химических соединений</p> <p align="center"><b>Удовлетворительн</b></p> <p>Имеет представление о наиболее популярных базах данных химических соединений Умеет искать структуры в базах данных, допуская ошибки, способен исправить их с помощью преподавателя Владеет некоторыми навыками безопасной работы с базами данных химических соединений</p>

<b>Компетенция</b>	<b>Планируемые результаты обучения</b>	<b>Критерии оценивания результатов обучения</b>
информационной безопасности		<p style="text-align: center;"><b>Удовлетворительн</b></p> <p>соединений</p> <p style="text-align: center;"><b>Хорошо</b></p> <p>Имеет представление о наиболее популярных базах данных химических соединений  Умеет искать структуры в базах данных, допуская ошибки, способен их самостоятельно исправить  Владеет некоторыми навыками безопасной работы с базами данных химических соединений</p> <p style="text-align: center;"><b>Отлично</b></p> <p>Имеет четкое представление о наиболее популярных базах данных химических соединений  Умеет искать структуры в базах данных  Владеет навыками безопасной работы с базами данных химических соединений</p>

## Оценочные средства текущего контроля и промежуточной аттестации

Схема доставки : Базовая

**Вид мероприятия промежуточной аттестации :** Зачет

**Способ проведения мероприятия промежуточной аттестации :** Оценка по дисциплине в рамках промежуточной аттестации определяется на основе баллов, набранных обучающимся на контрольных мероприятиях, проводимых в течение учебного периода.

**Максимальное количество баллов :** 100

### Конвертация баллов в отметки

«отлично» - от 81 до 100

«хорошо» - от 61 до 80

«удовлетворительно» - от 43 до 60

«неудовлетворительно» / «незачтено» менее 43 балла

Компетенция	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
<b>ОПК.3</b> способность осваивать новые технологии и применять их для проведения естественнонаучных исследований	Расчетные задачи, не связанные с молекулярным моделированием <b>Письменное контрольное мероприятие</b>	Умение работать с ПО для создания научной графики
<b>ОПК.3</b> способность осваивать новые технологии и применять их для проведения естественнонаучных исследований <b>ПК.5</b> способность получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий <b>ОПК.8</b> способность решать задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом основных требований информационной безопасности	Молекулярный граф и структура химического соединения <b>Письменное контрольное мероприятие</b>	Умение кодировать информацию о структуре молекулы с помощью SMILES.

Компетенция	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
<p><b>ОПК.3</b> способность осваивать новые технологии и применять их для проведения естественнонаучных исследований</p> <p><b>ПК.5</b> способность получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий</p> <p><b>ОПК.8</b> способность решать задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом основных требований информационной безопасности</p>	<p>Поиск химической информации в базах данных. Язык запросов SMARTS</p> <p><b>Защищаемое контрольное мероприятие</b></p>	<p>Умение записи структуры молекулы в формате SMILES и SMARTS. Умение работать с программами для манипуляции химическими структурами и поиска их в базах данных</p>

### Спецификация мероприятий текущего контроля

#### Расчетные задачи, не связанные с молекулярным моделированием

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **35**

Проходной балл: **15**

Показатели оценивания	Баллы
<p>По представленным данным построен график. Баллы вычитаются за: 1. Неверный выбор координатной системы (категориальная ось вместо линейной) - 2 балла. 2. Неверный тип графика (линейная регрессия на заведомо нелинейных данных) - 2 балла.</p>	13
<p>Общее оформление. Баллы вычитаются за: 1. Неподписанная ось/оси - 3 балла. 2. Необозначенные точки - 3 балла. 3. Наличие соединений между точками при неупорядоченном их расположении - 2 балла.</p>	8
<p>По графику произведен расчет какого-либо параметра: коэффициентов линейной регрессии, точки пересечения прямой. За неверно выбранный способ расчета/расчет вычитается 3 балла.</p>	6

#### Молекулярный граф и структура химического соединения

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы самостоятельной работы**

Максимальный балл, выставаемый за мероприятие промежуточной аттестации: **30**

Проходной балл: **13**

<b>Показатели оценивания</b>	<b>Баллы</b>
Задание 2. Кодирование информации с помощью SMILES. Работа с программой. Нарисовать в программе и закодировать строкой SMILES (12 баллов) выданную структуру. Поиск биологически-активных свойств закодированной структуры (5 баллов)	17
Задание 1. Ручное кодирование информации с помощью SMILES. Закодировать структуру строкой SMILES (10 баллов). Поиск биологически-активных свойств закодированной структуры (3 балла)	13

### **Поиск химической информации в базах данных. Язык запросов SMARTS**

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставаемый за мероприятие промежуточной аттестации: **35**

Проходной балл: **15**

<b>Показатели оценивания</b>	<b>Баллы</b>
Запись строки SMILES для предложенной структуры. Получение структуры для введенной строки.	5
Поиск по введенной строке в базе данных и нахождение свойств заданного соединения и близких к нему по структуре.	5
Оформление отчета о проделанной работе, включающего следующие элементы для каждого из найденных соединений: - Структура.- SMILES-строка.- InChi и InChi-key. - Название по IUPAC. - Патентованное название и не менее 2-х синонимов.- Биологическая/лекарственная активность. За отсутствие каждого из перечисленных элементов в отчете вычитается по 0,5 балла.	5
Поиск введенного соединения в базе данных и нахождение свойств заданного соединения и близких к нему по структуре.	5
Ввод структуры оптически активного соединения в программу. Проверка корректности введенного соединения по InChi Key	5