

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета
Белорусского государственного
университета

_____ Д.В. Свиридов

27.06.14

(дата утверждения)

Регистрационный № УД- 0662 /р.

ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ХИМИИ

**Учебная программа для специальности
1-31 05 01 Химия (по направлениям)**

Факультет химический

(название факультета)

Кафедра общей химии и методики преподавания химии

(название кафедры)

Курс (курсы) второй

Семестр (семестры) 3-4

Лекции 14
(количество часов)

Экзамен -
(семестр)

Практические (семинарские)
занятия 48
(количество часов)

Зачет 3,4
(семестр)

Лабораторные
занятия -
(количество часов)

Курсовой проект (работа) -
(семестр)

КСР 10

Всего аудиторных
часов по дисциплине 72
(количество часов)

Всего часов
по дисциплине 112
(количество часов)

Форма получения
высшего образования очная

Составил(а) А.А. Рагойша, доцент кафедры общей химии и методики преподавания химии

Учебная программа составлена на основе учебной программы «Информационные технологии в химии», Регистрационный № УД-1133/баз. от 26.06.14.

Рассмотрена и рекомендована к утверждению кафедрой общей химии и методики преподавания химии

(название кафедры)

протокол № 10 от 21.04.14

(дата, номер протокола)

Заведующий кафедрой

А.И.Лесникович

(подпись)

(И.О.Фамилия)

Одобрена и рекомендована к утверждению учебно-методической комиссией химического факультета Белорусского государственного университета

протокол № 5 от 26.05.14

(дата, номер протокола)

Председатель

Е.И.Василевская

(подпись)

(И.О.Фамилия)

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Информационные технологии, согласно стандарту СТУ ОП 6.3-01-02-2011, — это совокупность процессов, методов осуществления поиска, получения, передачи, сбора, обработки, накопления, хранения, распространения и (или) предоставления информации, а также пользования информацией и защиты информации.

В настоящее время новейшие идеи и достижения информационных технологий оперативно внедряются в Интернет, который становится основным информационным источником научной сферы. С учетом этой тенденции актуальной задачей является формирование у студентов отношения к Интернету как к рутинному инструменту учебной и научной деятельности.

Основные задачи данного курса заключаются в выработке навыков осмысленной работы с наиболее важными онлайн-информационными ресурсами и поисковыми инструментами, в отработке приемов оценки достоверности документа, освоении специализированных средств конструирования, визуализации химических структур и прогнозирования физико-химических параметров, обнаружения спектральных характеристик химических объектов.

В первой части курса проводится обучение студентов-химиков начальным навыкам работы с текстовыми онлайн-научными ресурсами: журналами, материалами конференций, диссертациями, книгами, полнотекстовыми, реферативными и библиографическими базами данных, патентами, нормативными документами, справочниками. Рассматриваются правила формулирования текстового запроса, алгоритмы извлечения информации и ее анализа.

Вторая часть курса знакомит обучающихся со структурными базами данных. На этом этапе вырабатываются навыки структурного поиска, анализа строения кристаллических и молекулярных химических объектов, методов извлечения ЯМР-, ИК-, масс-спектров, идентификации вещества по его спектральным данным.

В учебном курсе используются онлайн- и офлайн-информационные источники и прикладные программы; методическая поддержка обеспечивается использованием специально созданного веб-сайта.

После изучения данного курса обучаемый должен:

знать:

- синтаксис многокомпонентного текстового запроса;
- типовую структуру сайта издательства, научного журнала, агрегатора научных статей, патентной базы данных, справочной базы данных;
- типовую структуру онлайн-научной и научно-технологической публикации;
- методы информационного поиска на сайтах основных научных издательств (ACS, RSC, Elsevier, Springer, Wiley-Blackwell и др.), в патентных базах данных (espacenet, USPTO и др.);
- способы отражения структуры вещества в форме линейной нотации;

- область целесообразного использования CAS RN, SMILES, InChI в информационном поиске;
- приемы извлечения кристаллографической информации и структуру CIF-файлов;
- приемы работы со структурными апплетами, с программой Mercury, с пакетом программ ACD/Labs Freeware;

уметь:

- оценивать достоверность информационного источника и анализировать его содержание;
- осмысленно пользоваться вспомогательными инструментами онлайн-информационного поиска;
- осмысленно отбирать круг ресурсов, предположительно содержащих искомую информацию;
- вести целенаправленный поиск искомой информации и оперативно корректировать алгоритм работы;
- формулировать структурный запрос для поиска по структуре, по субструктуре, по степени подобия;
- обнаруживать ЯМР-, ИК-, масс-спектры заданных веществ;
- идентифицировать вещество по ЯМР-спектру, используя возможности базы данных SDBS.

Контроль усвоения знаний, навыков и умений осуществляется на всех практических занятиях в форме проверочных и контрольных работ.

Курс рассчитан на 72 аудиторных часа: 14 часов лекций, 48 часов практических занятий в компьютерном классе, подключенном к сети Интернет, 10 часов контролируемой самостоятельной работы.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Номер	Название раздела, темы	Количество часов					Самостоятельная работа
		Аудиторные					
		лекции	практические (семинарские) занятия	лабораторные занятия	контролируемая самостоятельная работа студента		
1	2	3	4	5	6	7	
	1. Онлайн-текстовые научные базы данных						
1	Терминология Интернета. Проблема достоверности онлайн-ресурсов.	2				1	
2	Синтаксис запроса в текстовых базах данных.	2				1	
3	Первичные и вторичные источники научной информации по химии	4				2	
4	Поиск и анализ химической информации на сайтах научных журналов		8			6	
5	Нежурнальные первичные информационные источники.		4			2	
6	Библиографические и реферативные базы данных.		3		1	2	
7	Патентные базы данных.		3		1	3	
8	Нормативная литература: стандарты, сертификаты безопасности веществ.		3		1	2	
9	Текстовый и числовой поиск в справочных базах данных		3		1	2	
10	Итоговая контрольная работа				2	1	
	2. Онлайн-структурные базы данных						
11	Способы условного отображения химического вещества в форме текстовой строки.	2				2	
12	Структурная формула и трехмерная молекулярная модель как информационные пакеты и как объекты хемоинформатики.	4				2	

1	2	3	4	5	6	7
13	Кристаллографические базы данных и визуализация кристаллических структур.		3		1	2
14	Структурный поиск. Формирование запроса с помощью апплета.		4			2
15	Линейные нотации. CAS RN, SMILES, InChI в информационном поиске.		4			2
16	Онлайновые базы данных по органическому синтезу.		3		1	2
17	Онлайновые спектральные базы данных (ЯМР, ИК, MS).		6			3
18	Пакет программ ACD/Labs Freeware: молекулярный, графический редактор; моделирование трехмерных структур.		4			2
19	Итоговая контрольная работа				2	1
Итого		14	48	-	10	40

Учебно-методическая карта

Номер	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов				Методические пособия, средства обучения	Литература	Форма контроля знаний
		лекции	практические занятия	лабораторные занятия	КСР			
1	2	3	4	5	6	7	8	9
	1. Онлайн-текстовые научные базы данных							
1	Терминология Интернета. Проблема достоверности онлайн-ресурсов. HTTP, гипертекст, гиперсвязь, World Wide Web, веб-сервер, IP-адрес, домен и доменное имя, сайт, веб-страница, Главная страница сайта, URL, поисковая система, метапоисковая система, тематический каталог, метасайт, портал, браузер. Первоисточник и интерпретация. Стандартные приемы формальной оценки степени достоверности онлайн-информационного источника. Вспомогательные инструменты информационного поиска.	2				Компьютерная презентация, проектор	1	
2	Синтаксис запроса в текстовых базах данных. Структура текстовой базы данных: запись, поле, вспомогательные указатели (индексы). Запрос. Логические операторы. Оператор по умолчанию. Операторы расстояния. Шаблон. Stemming. Регистр букв. Стоп-слова. Поле как элемент поискового задания. Поисковые бланки. Ранжирование списка результатов по релевантности.	2				Компьютерная презентация, проектор	1	

3	Первичные и вторичные источники научной информации по химии. Научный журнал. Научная статья. Препринт, постпринт. Материалы конференции. Тезисы докладов. Диссертация. Автореферат диссертации. Научный отчет. Депонированная рукопись. Книга. Копирайт. Реферативный журнал. Библиографическое описание. Импакт-фактор. Индекс цитирования. Инициатива Open Access. DOI. Патент как источник научной информации.	4				Компьютерная презентация, проектор	2, 5	
4	Поиск и анализ химической информации на сайтах научных журналов Стандартная цепочка гиперсвязей от Главной страницы сайта издательства к тексту статьи. Статьи в форматах PDF и HTML. Иллюстрации встроенные и внешние. Гиперсвязи в статье и в списке использованной литературы. Электронные дополнения к статьям. Порталы ScienceDirect, SpringerLink, Wiley Online Library. Сайты издательств American Chemical Society, Royal Society of Chemistry, МАИК Наука /Interperiodica, НАН Беларуси. Инструменты обнаружения онлайн-журналов (Genamics JournalSeek, ABC-Chemistry и др). Библиографический и тематический поиск.		8			Компьютер, Интернет, онлайн-ресурсы	2, 3, 6	Контр. задания
5	Нежурнальные первичные информационные источники. Сайт конференции. Университетские, национальные и международные репозитории научных публикаций. Базы данных с материалами диссертаций. Книги. Электронные библиотеки. Специализированные поисковые системы. Google Book Search.		4			Компьютер, Интернет, онлайн-ресурсы	3, 6	Контр. задания
6	Библиографические и реферативные базы данных. Агрегаторы J-STAGE, SCIELO, PubMed Central, EBSCOhost, IngentaConnect, DOAJ, eLibrary, INIS. Реферативный журнал "Химия". Специализированная поисковая система Google Scholar.		3		1	Компьютер, Интернет, онлайн-ресурсы	3, 6	Контр. задания

7	Патентные базы данных. Патент, патентная заявка. Патентные базы данных Espacenet, Национального центра интеллектуальной собственности Республики Беларусь, USPTO, Роспатента, PAJ, Google Patents.		3		1	Компьютер, Интернет, онлайн-ресурсы	5, 6, 10	Контр. задания
8	Нормативная литература: стандарты, сертификаты безопасности веществ. ГОСТ, ТУ, СанПиН как источники химической информации. Базы данных нормативной документации. Сертификаты безопасности материала (MSDS). Характеристика достоверности информации, имеющейся в сертификате. Онлайн-базы данных, содержащие MSDS; метасайты.		3		1	Компьютер, Интернет, онлайн-ресурсы	3, 6	Контр. задания
9	Текстовый и числовой поиск в справочных базах данных. Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database. Термодинамические базы данных на сайте химфака МГУ. Особенности информации в ChemSpider и Википедии. Метасайты, содержащие адреса, описания и рекомендации по использованию бесплатных справочных баз данных.		3		1	Компьютер, Интернет, онлайн-ресурсы	3, 6	Контр. задания
10	Итоговая контрольная работа				2	Интернет,	1-6	Контр. раб.
2. Онлайн-структурные базы данных								
11	Способы условного отображения химического вещества в форме текстовой строки. CAS RN, SMILES, InChI, InChIKey.	2				Компьютерная презентация, проектор	4, 6, 7-9	Контр. задания
12	Структурная формула и трехмерная молекулярная модель как информационные пакеты и как объекты хемоинформатики. Таблица соединений и MDL Molfile. Способы визуализации трехмерной структуры. Молекулярная поверхность. Структура, субструктура, подобие структур. Коэффициент Танимото. Файловый формат CIF. Понятие о молекулярных и физико-химических дескрипторах, молекулярном докинге, Data Mining, QSAR и QSPR.	4				Компьютерная презентация, проектор	4, 6, 7-9	Контр. задания

13	Кристаллографические базы данных и визуализация кристаллических структур. Кристаллографическая информация в онлайн-научных журналах. Онлайн-архивы CIF-файлов. Приемы работы с прикладной программой Mercury: визуализация кристаллической структуры вещества; определение структурных параметров.		3		1	Компьютер, Интернет, онлайн-ресурсы	4, 6, 11	Контр. задания
14	Структурный поиск. Формирование запроса с помощью апплета. Апплеты NIST Molecular Editor, JME, MarvinSketch. Поиск по структуре, субструктуре и по подобию структур: формирование запроса и коррекция поиска. Научный документ с элементами Web 3.0.		4			Компьютер, Интернет, онлайн-ресурсы	4, 6	Контр. задания
15	Линейные нотации. Регистрационные номера химических веществ. CAS RN. Основные правила формулирования кода SMILES. Средства генерирования кодов InChI, InChIKey. Область использования линейных нотаций в информационном поиске. Формульные указатели и система Хилла.		4			Компьютер, Интернет, онлайн-ресурсы	4, 6	Контр. задания
16	Онлайн-базы данных по органическому синтезу. Каталоги химических реактивов. Методики органического синтеза в онлайн-литературе. Приемы извлечения и анализа сведений из баз данных ChemSynthesis, ChemSpider SyntheticPages, Organic Syntheses.		3		1	Компьютер, Интернет, онлайн-ресурсы	4, 6	Контр. задания
17	Онлайн-спектральные базы данных (ЯМР, ИК, MS). Онлайн-репозитории спектральных данных. Спектры веществ в NIST Chemistry WebBook. Спектроскопические ресурсы RIO-DB. Методика извлечения спектральной информации (ЯМР-, масс-, ИК-спектров) из базы данных SDBS. SDBS как инструмент идентификации вещества по ЯМР-спектру. ChemSpider как онлайн-центр структурной информации; границы достоверности сведений, содержащихся в ChemSpider.		6			Компьютер, Интернет, онлайн-ресурсы	4, 6	Контр. задания

18	Пакет программ ACD/Labs Freeware: молекулярный, графический редактор; моделирование трехмерных структур. Изготовление иллюстративного материала; конвертирование двумерных структур в трехмерные; создание файлов с информацией о структуре вещества; формирование заданий для ведения структурного поиска в базах данных. Генерирование названий веществ, линейных нотаций; расчет молекулярных параметров.		4			Компьютер, Интернет, онлайн-ресурсы	4, 6, 11	Контр. задания
19	Итоговая контрольная работа				2	Компьютер, Интернет, онлайн-ресурсы	1-11	Контр. работа
Итого		14	48	-	10			

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. А. А. Рагойша. Поиск химической информации в Интернете. Поисковые системы и тематические каталоги: Учеб. пособие для студентов хим. фак. – Мн.: БГУ, 2003.
2. А. А. Рагойша. Поиск химической информации в Интернете: научные публикации : учеб. пособие для студентов хим. фак. спец. 1-31 05 01. – Мн.: БГУ, 2007.
3. А. А. Рагойша. Текстовый поиск научной химической информации в Интернете [Электронный ресурс] : практикум по курсу "Информационные технологии в химии" для студентов спец. 1-31 05 01 Химия (по направлениям). — Минск: БГУ, 2012. — <http://elib.bsu.by/handle/123456789/14599>.
4. А. А. Рагойша. Поиск информации о структуре химического вещества в онлайн-базах данных : практикум по курсу "Информационные технологии в химии" для студентов специальности 1-31 05 01 Химия (по направлениям). – Минск : БГУ, 2013. – <http://elib.bsu.by/handle/123456789/44282>.
5. В. М. Потапов, Э. К. Кочетова. Химическая информация. Где и как искать химику нужные сведения. – М.: Химия, 1988.
6. А. А. Рагойша. Азбука веб-поиска для химиков [Электронный ресурс] – Минск, БГУ, 1999-2012. — <http://www.abc.chemistry.bsu.by>.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

7. Chemoinformatics: A Textbook. Edited by Johann Gasteiger and Thomas Engel. – Wiley-VCH, 2003.
8. В. А. Bunin, В. Siesel, G. A. Morales, J. Vajorath. Chemoinformatics: Theory, Practice, & Products. – Springer, 2007.
9. Andrew R. Leach, Valerie J. Gillet. An Introduction to Chemoinformatics. – Springer, 2007.
10. Е. А. Устинова. Формулы изобретения на химические объекты. – М.: ИНФРА-М, 1997.
11. Руководства пользователя к прикладным программам.