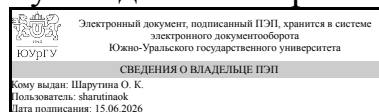


УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель направления



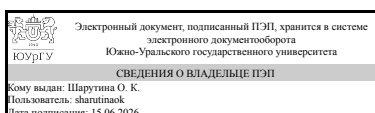
О. К. Шарутина

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины 1.О.06 Хемоинформатика
для направления 04.04.01 Химия
уровень Магистратура
форма обучения очная
кафедра-разработчик Теоретическая и прикладная химия

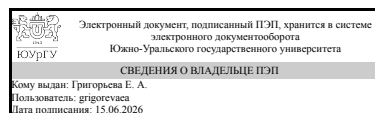
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 13.07.2017 № 655

Зав.кафедрой разработчика,
д.хим.н., проф.



О. К. Шарутина

Разработчик программы,
к.хим.н., доц., доцент



Е. А. Григорьева

1. Цели и задачи дисциплины

Целью изучения дисциплины является теоретическая и практическая подготовка студентов решать важнейшие задачи дизайна новых веществ и материалов с требуемыми свойствами. С учетом современного цифрового уровня развития химической науки, владение навыками моделирования «структура – свойство вещества» обеспечит научный базис для подготовки магистров в сфере фундаментальной химии, материаловедения, цифровых химических технологий. Задача дисциплины «Хемоинформатика» состоит в освоении студентами приемов и методов моделирования строения и структуры кристаллов, жидкостей, газов и прогнозирования свойств вещества, что необходимо при создании новых кристаллических материалов, полимеров, катализаторов, фотокатализаторов, реагентов для нефтехимии, и т.д. В результате изучения дисциплины студенты должны овладеть современными методами создания статистических моделей строения химических соединений, которые на основании структуры могут прогнозировать свойства состоящих из них материалов. В процессе изучения дисциплины «Хемоинформатика» закладывается общенаучный и профессиональный фундамент, формируются основные приемы цифровых химических технологий и познавательной деятельности, без которых не может обойтись современный специалист, работая в различных областях химической, биохимической науки или материаловедения.

Краткое содержание дисциплины

История развития подходов к анализу взаимосвязей «структура – свойство». Разные уровни атомно-молекулярных дескрипторов в химии. Построение и валидация моделей атомно-молекулярных систем. Нахождение количественных и качественных взаимосвязей «структура – свойство». Требования к построению математических моделей, лежащих в основе прогноза свойств вещества. Методы машинного обучения в хемоинформатике. ND-QSAR.

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ОПК-3 Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	Знает: основные понятия и определения хемоинформатики (типы молекулярных дескрипторов, QSPR - взаимосвязь "структура - свойство", построение и валидация моделей "структура - свойство") Умеет: строить QSPR модели, определять их достоверность, адекватность, статистическую значимость Имеет практический опыт: кодировки состава и структуры молекул с помощью спецификации SMILES, поиска связи между структурой химических объектов и их свойствами

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана	Перечень последующих дисциплин, видов работ
Нет	Не предусмотрены

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам студента, необходимым при освоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Нет

4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 ч., 70,5 ч. контактной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах	
		Номер семестра	
		2	
Общая трудоёмкость дисциплины	108	108	
<i>Аудиторные занятия:</i>	64	64	
Лекции (Л)	32	32	
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	0	0	
Лабораторные работы (ЛР)	32	32	
<i>Самостоятельная работа (СРС)</i>	37,5	37,5	
Оформление отчетов по лабораторным работам	30	30	
Подготовка к дифференцированному зачету	7,5	7,5	
Консультации и промежуточная аттестация	6,5	6,5	
Вид контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)	-	диф.зачет	

5. Содержание дисциплины

№ раздела	Наименование разделов дисциплины	Объем аудиторных занятий по видам в часах			
		Всего	Л	ПЗ	ЛР
1	Введение в хемоинформатику	2	2	0	0
2	Представления молекулярных структур	12	8	0	4
3	Дескрипторы атомно-молекулярных систем	4	4	0	0
4	Построение количественных моделей «структура-свойство». Методы машинного обучения в химии	46	18	0	28

5.1. Лекции

№ лекции	№ раздела	Наименование или краткое содержание лекционного занятия	Кол-во часов
1	1	Введение в хемоинформатику. Хемоинформатика как научная дисциплина. Цели, задачи, объекты изучения хемоинформатики. Востребованность	2

		моделей строения вещества и их использование в прогнозах свойств. Сферы применения методов хемоинформатики.	
2	2	Представления молекулярных структур. Линейные представления SMILES, WLN, SLN. Представления с применением теории графов. Векторные представления. Матричные представления: матрица смежности, матрица расстояний, матрица инцидентности, матрица связей, матрица связей-электронов. Структуры Маркуша.	2
3, 4, 5	2	Трехмерные представления. Координатные представления. Молекулярные поверхности. Молекулярные формы. Обменные форматы файлов MOL, SDF, RXN, RDF, MOL2. Конвертация представлений: структура-линейное, структура-систематическое имя, двумерной структуры в трехмерную. Методы конформационного поиска. Методы молекулярного моделирования. Программы конвертации между представлениями. Представления химических реакций: как набор реагентов и продуктов, характеристик реакционного центра, разности продуктов и реагентов.	6
6, 7	3	Классификация дескрипторов атомно-молекулярных систем. Топологические дескрипторы. 3D дескрипторы. Электронные свойства и дескрипторы на их основе. Физико-химические и фармакофорные дескрипторы.	4
8, 9	4	Общие принципы построения количественных моделей и взаимосвязей «структура – свойство». Качественные и количественные показатели качества моделей «структура – свойство». Валидация моделей: принцип Сетубала, рекомендации Унгера-Ганча, примеры наилучших практик.	4
10, 11, 12	4	Методы машинного обучения. Краткая история. Основные понятия. Множественная линейная регрессия (MLR). Пошаговый метод MLR. Метод частичных наименьших квадратов (PLS). Метод ближайших соседей (k-NN). Метод опорных векторов (SVM). Деревья принятия решений (DT).	6
13	4	Искусственные нейронные сети. Основные принципы построения и работы нейронных сетей. Обучение сети, переучивание.	2
14	4	Модели «структура-свойство» для разных типов химических объектов.	2
15	4	Программы для моделирования "Структура-свойство".	2
16	4	Обзор методов моделирования 3D-QSAR И ND-QSAR.	2

5.2. Практические занятия, семинары

Не предусмотрены

5.3. Лабораторные работы

№ занятия	№ раздела	Наименование или краткое содержание лабораторной работы	Кол-во часов
3	2	Кодировка состава и структуры молекул с помощью спецификации SMILES.	4
1	4	Настройка пользовательского интерфейса. Расчетные и графические возможности системы Microsoft Excel.	4
2	4	Предобработка данных для анализа в Microsoft Excel. Построение сводных таблиц. Макросы.	4
4	4	Аналитическая система Statistica, 1 часть. Настройка пользовательского интерфейса. Графические возможности системы.	4
5	4	Аналитическая система Statistica, 2 часть. Классификация данных.	4
6	4	Аналитическая система Statistica, 3 часть. Количественные показатели качества регрессионных моделей. Предсказательные способности моделей.	4
7	4	Информационная система ISIDA, 1 часть. Построение индивидуальной модели MLR: настройка моделирования «структура – условие – свойство»	4

		вещества».	
8	4	Информационная система ISIDA, 2 часть. Построение консенсусной модели: получение, статистические параметры, анализ ансамбля выбранных моделей.	4

5.4. Самостоятельная работа студента

Выполнение СРС			
Подвид СРС	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц) / ссылка на ресурс	Семестр	Кол-во часов
Оформление отчетов по лабораторным работам	1. Боровиков, В. П. Программа STATISTICA для студентов и инженеров В. П. Боровиков. - 2-е изд. - М.: Компьютер-пресс, 2001. - 299,[1] с. ил, стр. 48-199. 2. Сайт автора программы ISIDA/QSPR http://vpsolovev.ru/programs/isidaqspr/ 3. Интегрированные пакеты прикладных программ: учеб. пособие по направлению "Приклад. информатика" / В. А. Конов, Е. Н. Горных ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Информатика ; ЮУрГУ http://www.lib.susu.ac.ru/ftd?base=SUSU_METHOD&key=000529140 (стр. 37, раздел 2) 4. Структура, правила оформления, порядок представления и защиты выпускной квалификационной работы по направлениям подготовки 04.03.01 Химия (уровень бакалавриата) и 04.04.01 Химия (уровень магистратуры) [Электронный ресурс] : метод. указания / Л. А. Сидоренкова, О. К. Шарутина, Е. И. Данилина ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Теорет. и приклад. химия ; ЮУрГУ http://www.lib.susu.ac.ru/ftd?base=SUSU_METHOD&key=000561875 (стр. 15, раздел 6)	2	30
Подготовка к дифференцированному зачету	1. Введение в хемоинформатику в 5 ч. И. И. Баскин, Т. И. Маджидов, А. А. Варнек ; Казан. федер. ун-т. - Казань: Издательство Казанского университета, 2017. Часть 2-4. 2. Персональный конспект лекций.	2	7,5

6. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации

Контроль качества освоения образовательной программы осуществляется в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе оценивания результатов учебной деятельности обучающихся.

6.1. Контрольные мероприятия (КМ)

№ КМ	Се-местр	Вид контроля	Название контрольного мероприятия	Вес	Макс. балл	Порядок начисления баллов	Учитывается в ПА
1	2	Текущий контроль	Отчет по лабораторной работе №1	1	10	Лабораторная работа выполняется в компьютерном классе, оформляется отчет по проделанной работе индивидуально каждым студентом. Максимальный балл за работу составляет 10 баллов. Баллы за отчет по лабораторной работе начисляются за: - очное выполнение лабораторной	дифференцир зачет

					<p>работы - 1 балл.</p> <p>- сдачу отчета в установленный срок - 1 балл.</p> <p>- отчет по лабораторной работе выполнен в полном объеме (заполнены все необходимые разделы), расчетно-графическая часть выполнена без ошибок, вывод составлен с учетом анализа результатов расчета - 8 баллов.</p> <p>7 баллов – работа выполнена в полном объеме, допускается наличие 1-2 незначительных ошибок, которые студент может самостоятельно устранить.</p> <p>6 баллов – работа полностью оформлена, но имеются незначительные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 85% случаев.</p> <p>5 баллов – работа полностью оформлена, но имеются незначительные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 80% случаев.</p> <p>4 балла – работа полностью оформлена, но имеются незначительные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 75% случаев.</p> <p>3 балла – работа полностью оформлена, но имеются незначительные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 70% случаев.</p> <p>2 балла – в работе приведены ответы на поставленные вопросы и лишь в 65 % случаев ответы являются верными. Расчетно-графическая часть работы выполнена с грубыми ошибками, выводы не/частично отражают факт достижения цели работы.</p> <p>1 балл – в работе приведены ответы на поставленные вопросы и лишь в 60 % случаев ответы являются верными. Расчетно-графическая часть работы выполнена с грубыми</p>
--	--	--	--	--	---

						<p>ошибками, выводы не/частично отражают факт достижения цели работы.</p> <p>0 баллов – работа оформлена частично, либо выполнен не свой вариант задания.</p> <p>При оценивании качества работы преподавателем могут быть использованы «штрафы» за несвоевременное выполнение работ по неуважительной причине, нарушение сроков сдачи заданий (на 2 и более недель) - до 2 баллов.</p>	
2	2	Текущий контроль	Отчет по лабораторной работе № 2	1	10	<p>Лабораторная работа выполняется в компьютерном классе, оформляется отчет по проделанной работе индивидуально каждым студентом. Максимальный балл за работу составляет 10 баллов.</p> <p>Баллы за отчет по лабораторной работе начисляются за:</p> <ul style="list-style-type: none"> - очное выполнение лабораторной работы - 1 балл. - сдачу отчета в установленный срок - 1 балл. - отчет по лабораторной работе выполнен в полном объеме (заполнены все необходимые разделы), расчетно-графическая часть выполнена без ошибок, вывод составлен с учетом анализа результатов расчета - 8 баллов. <p>7 баллов – работа выполнена в полном объеме, допускается наличие 1-2 незначительных ошибок, которые студент может самостоятельно устранить.</p> <p>6 баллов – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 85% случаев.</p> <p>5 баллов – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 80% случаев.</p> <p>4 балла – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В</p>	дифференцир зачет

					<p>целом, ответы являются верными в 75% случаев.</p> <p>3 балла – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 70% случаев.</p> <p>2 балла – в работе приведены ответы на поставленные вопросы и лишь в 65 % случаев ответы являются верными. Расчетно-графическая часть работы выполнена с грубыми ошибками, выводы не/частично отражают факт достижения цели работы.</p> <p>1 балл – в работе приведены ответы на поставленные вопросы и лишь в 60 % случаев ответы являются верными. Расчетно-графическая часть работы выполнена с грубыми ошибками, выводы не/частично отражают факт достижения цели работы.</p> <p>0 баллов – работа оформлена частично, либо выполнен не свой вариант задания.</p> <p>При оценивании качества работы преподавателем могут быть использованы «штрафы» за несвоевременное выполнение работ по неуважительной причине, нарушение сроков сдачи заданий (на 2 и более недель) - до 2 баллов.</p>		
3	2	Текущий контроль	Отчет по лабораторной работе № 3	1	10	<p>Лабораторная работа выполняется в компьютерном классе, оформляется отчет по проделанной работе индивидуально каждым студентом. Максимальный балл за работу составляет 10 баллов.</p> <p>Баллы за отчет по лабораторной работе начисляются за:</p> <ul style="list-style-type: none"> - очное выполнение лабораторной работы - 1 балл. - сдачу отчета в установленный срок - 1 балл. - отчет по лабораторной работе выполнен в полном объеме (заполнены все необходимые разделы), расчетно-графическая часть выполнена без ошибок, вывод составлен с учетом анализа результатов расчета - 8 баллов. <p>7 баллов – работа выполнена в полном объеме, допускается наличие</p>	дифференцир зачет

					<p>1-2 незначительных ошибок, которые студент может самостоятельно устранить.</p> <p>6 баллов – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 85% случаев.</p> <p>5 баллов – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 80% случаев.</p> <p>4 балла – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 75% случаев.</p> <p>3 балла – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 70% случаев.</p> <p>2 балла – в работе приведены ответы на поставленные вопросы и лишь в 65 % случаев ответы являются верными. Расчетно-графическая часть работы выполнена с грубыми ошибками, выводы не/частично отражают факт достижения цели работы.</p> <p>1 балл – в работе приведены ответы на поставленные вопросы и лишь в 60 % случаев ответы являются верными. Расчетно-графическая часть работы выполнена с грубыми ошибками, выводы не/частично отражают факт достижения цели работы.</p> <p>0 баллов – работа оформлена частично, либо выполнен не свой вариант задания.</p> <p>При оценивании качества работы преподавателем могут быть использованы «штрафы» за несвоевременное выполнение работ по неуважительной причине, нарушение сроков сдачи заданий (на</p>
--	--	--	--	--	--

						2 и более недель) - до 2 баллов.	
4	2	Текущий контроль	Отчет по лабораторной работе № 4	1	10	<p>Лабораторная работа выполняется в компьютерном классе, оформляется отчет по проделанной работе индивидуально каждым студентом. Максимальный балл за работу составляет 10 баллов.</p> <p>Баллы за отчет по лабораторной работе начисляются за:</p> <ul style="list-style-type: none"> - очное выполнение лабораторной работы - 1 балл. - сдачу отчета в установленный срок - 1 балл. - отчет по лабораторной работе выполнен в полном объеме (заполнены все необходимые разделы), расчетно-графическая часть выполнена без ошибок, вывод составлен с учетом анализа результатов расчета - 8 баллов. <p>7 баллов – работа выполнена в полном объеме, допускается наличие 1-2 незначительных ошибок, которые студент может самостоятельно устранить.</p> <p>6 баллов – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 85% случаев.</p> <p>5 баллов – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 80% случаев.</p> <p>4 балла – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 75% случаев.</p> <p>3 балла – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 70% случаев.</p> <p>2 балла – в работе приведены ответы на поставленные вопросы и лишь в 65 % случаев ответы являются</p>	дифференцир зачет

						<p>верными. Расчетно-графическая часть работы выполнена с грубыми ошибками, выводы не/частично отражают факт достижения цели работы.</p> <p>1 балл – в работе приведены ответы на поставленные вопросы и лишь в 60 % случаев ответы являются верными. Расчетно-графическая часть работы выполнена с грубыми ошибками, выводы не/частично отражают факт достижения цели работы.</p> <p>0 баллов – работа оформлена частично, либо выполнен не свой вариант задания.</p> <p>При оценивании качества работы преподавателем могут быть использованы «штрафы» за несвоевременное выполнение работ по неуважительной причине, нарушение сроков сдачи заданий (на 2 и более недель) - до 2 баллов.</p>	
5	2	Текущий контроль	Рейтинг лекционного участия	2	5	<p>Баллы начисляются за очное присутствие на лекциях (в процентном соотношении), за участие в обсуждениях, умение формулировать аргументированные ответы в рамках курса.</p>	дифференцированный зачет
6	2	Промежуточная аттестация	дифференцированный зачет	-	5	<p>При оценке устного ответа используется следующая шкала оценивания:</p> <p>5 баллов – приведен полный ответ на вопрос.</p> <p>4 балла – в ответе изложено не менее 80% полного ответа, могут содержаться 1-2 ошибки;</p> <p>3 балла – в ответе изложено не менее 60% полного ответа;</p> <p>2 балла – ответ неполный, но при этом изложено не менее 40% полного ответа;</p> <p>1 балл – изложено менее 20% верного ответа на вопрос.</p> <p>0 баллов – ответ отсутствует.</p>	дифференцированный зачет

6.2. Процедура проведения, критерии оценивания

Вид промежуточной аттестации	Процедура проведения	Критерии оценивания
дифференцированный зачет	На зачете происходит оценивание учебной деятельности обучающихся по дисциплине на основе полученных оценок за контрольно-рейтинговые мероприятия текущего контроля. Студент может улучшить свой рейтинг, пройдя контрольное мероприятие промежуточной аттестации -	В соответствии с пп. 2.5, 2.6 Положения

	дифференцированный зачет. Зачет проводится во время, указанное в расписании, в виде устного опроса. Студенту задаются 2 вопроса из разных тем курса. Студенту дается 60 минут на подготовку ответов. Затем студент озвучивает свои ответы.	
--	--	--

6.3. Паспорт фонда оценочных средств

Компетенции	Результаты обучения	№ КМ					
		1	2	3	4	5	6
ОПК-3	Знает: основные понятия и определения хемоинформатики (типы молекулярных дескрипторов, QSPR - взаимосвязь "структура - свойство", построение и валидация моделей "структура - свойство")	+	+	+	+	+	+
ОПК-3	Умеет: строить QSPR модели, определять их достоверность, адекватность, статистическую значимость		+	+	+	+	+
ОПК-3	Имеет практический опыт: кодировки состава и структуры молекул с помощью спецификации SMILES, поиска связи между структурой химических объектов и их свойствами	+	+	+	+	+	+

Типовые контрольные задания по каждому мероприятию находятся в приложениях.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

1. Боровиков, В. П. Прогнозирование в системе STATISTICA в среде Windows: Основы теории и интенсивная практика на компьютере Учеб. пособие для вузов по специальности "Прикладная математика" В. П. Боровиков, Г. И. Ивченко. - М.: Финансы и статистика, 2000. - 382 с. ил.
2. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Текст] учеб. пособие для вузов по химико-технол. направлениям и специальностям В. Г. Цирельсон. - 3-е изд., испр. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. - 495 с. ил., [12] л. цв. ил.; табл.

б) дополнительная литература:

1. Баскин, И. И. Введение в хемоинформатику [Текст] Ч. 5 Информатика химических реакций в 5 ч. И. И. Баскин, Т. И. Маджидов, А. А. Варнек ; Казан. федер. ун-т. - Казань: Издательство Казанского университета, 2017. - 242 с. ил.

в) отечественные и зарубежные журналы по дисциплине, имеющиеся в библиотеке:

Не предусмотрены

г) методические указания для студентов по освоению дисциплины:

1. Структура, правила оформления, порядок представления и защиты выпускной квалификационной работы по направлениям подготовки 04.03.01 Химия (уровень бакалавриата) и 04.04.01 Химия (уровень магистратуры) [Электронный ресурс] : метод. указания / Л. А. Сидоренкова, О. К. Шарутина, Е. И. Данилина ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Теорет. и приклад. химия ; ЮУрГУ http://www.lib.susu.ac.ru/ftd?base=SUSU_METHOD&key=000561875

2. Интегрированные пакеты прикладных программ: учеб. пособие по направлению "Приклад. информатика" / В. А. Конов, Е. Н. Горных ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Информатика ; ЮУрГУ
http://www.lib.susu.ac.ru/ftd?base=SUSU_METHOD&key=000529140

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

1. Структура, правила оформления, порядок представления и защиты выпускной квалификационной работы по направлениям подготовки 04.03.01 Химия (уровень бакалавриата) и 04.04.01 Химия (уровень магистратуры) [Электронный ресурс] : метод. указания / Л. А. Сидоренкова, О. К. Шарутина, Е. И. Данилина ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Теорет. и приклад. химия ; ЮУрГУ
http://www.lib.susu.ac.ru/ftd?base=SUSU_METHOD&key=000561875

2. Интегрированные пакеты прикладных программ: учеб. пособие по направлению "Приклад. информатика" / В. А. Конов, Е. Н. Горных ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Информатика ; ЮУрГУ
http://www.lib.susu.ac.ru/ftd?base=SUSU_METHOD&key=000529140

Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной форме	Библиографическое описание
1	Дополнительная литература	eLIBRARY.RU	Grigoreva, E. A. Covalent Doping of g-C ₃ N ₄ with Carbazole and Benzochalcogenadiazoles: Simulation of Electronic Properties in Alternative Approximations / E. A. Grigoreva, Y. V. Matveychuk // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. – 2024. – DOI 10.1134/s0040579524600979. – EDN WAUCXX. https://www.elibrary.ru/item.asp?id=75033364
2	Основная литература	ЭБС издательства Лань	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: 15.06.2026). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

Перечень используемого программного обеспечения:

1. ФГАОУ ВО "ЮУрГУ (НИУ)"-Портал "Электронный ЮУрГУ" (<https://edu.susu.ru>)(бессрочно)
2. Avogadro Chemistry-Avogadro: Molecular Editor and Visualization(бессрочно)
3. BlueSnap-Chemcraft(бессрочно)

Перечень используемых профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

1. -The Cambridge Crystallographic Data Centre(31.12.2023)

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Вид занятий	№ ауд.	Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение, используемое для
-------------	--------	--

		различных видов занятий
Лекции	707 (1)	Мультимедийное оборудование для проведения лекций
Лабораторные занятия	707 (1)	Программа статистического анализа Statistica, Информационная система ISIDA/QSPR для построения количественных моделей «структура-свойство»