

к приказу директора ИОС УрО РАН
от 10.12.2018 №100

Министерство науки и высшего образования
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт органического синтеза им. И.Я. Пастовского
Уральского отделения Российской академии наук
(ИОС УрО РАН)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
элемента ООП подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре

ХЕМОИНФОРМАТИКА

Направление подготовки:

18.06.01 Химическая технология

Направленность:

Технология органических веществ

Квалификация:

«Исследователь. Преподаватель-исследователь»

Форма обучения:

Очная

Раздел ООП:

Блок Б 1. «Дисциплины (модули)». Вариативная часть

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНСТВО НАУЧНЫХ ОРГАНИЗАЦИЙ
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского
Уральского отделения Российской академии наук
(ИОС УрО РАН)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
элемента ООП подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре

ХЕМОИНФОРМАТИКА

Направление подготовки:

18.06.01 Химическая технология

Направленность:

Технология органических веществ

Квалификация:

«Исследователь. Преподаватель-исследователь»

Форма обучения:

Очная

Раздел ООП:

Блок Б 1. «Дисциплины (модули)». Вариативная часть

Программа дисциплины составлена на основании федерального государственного образовательного стандарта к основной образовательной программе высшего образования – программе подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению 18.06.01 Химическая технология, утвержденного приказом Минобрнауки России от 30.07.2014 № 883, с учетом приказа Минобрнауки России от 30.04.2015 № 464 «О внесении изменений в федеральные государственные образовательные стандарты высшего образования (уровень кадров высшей квалификации)».

АННОТАЦИЯ ПРОГРАММЫ

Программа предназначена для аспирантов, обучающихся по образовательным программам высшего образования – программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом.

Дисциплина «Хемоинформатика» относится к вариативной части Блока 1 «Дисциплины (модули)» ООП аспирантуры и является дисциплиной, обязательной для освоения по программе аспирантуры.

Рабочая программа соответствует:

- паспорту научной специальности 05.17.04 (направленность Технология органических веществ);
- учебному плану по ООП аспирантуры ИОС УрО РАН.

Освоение дисциплины осуществляется на первом курсе (1-2 семестры) обучения в соответствии с графиком учебного процесса.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е. (144 час.), в том числе:

- аудиторная работа - 2,0 з.е. (72 ч), представлена лекционными – 0,5 з.е. (18 ч) и лабораторными – 1,5 з.е. (54 ч) занятиями;
- самостоятельная деятельность аспиранта - 2,0 з.е. (72 ч).

Цель изучения дисциплины – формирование у аспирантов понимания необходимости знания о современных компьютерных системах автоматизации научных исследований (АСНИ), проектирования (САПР) и управления (АСУ), в том числе химико-технологическими процессами.

Задачи дисциплины – сформировать у аспирантов способность и готовность самостоятельно использовать математическое моделирование и информационные технологии в профессиональной деятельности, в том числе, для приобретения новых знаний и умений, при эксплуатации современного оборудования и приборов, при создании новых материалов и технологических процессов.

Систематизирование материала по дисциплине происходит в рамках шести разделов:

- Введение;
- Презентация и компьютерная манипуляция молекулярных структур;
- Молекулярные дескрипторы;
- Расчетные методы количественной зависимости структура – активность (свойство) QSAR/QSPR;
- Корпоративные информационные системы управления предприятием;
- Использование информационных технологий для решения типовых инженерно-экологических и управленческих задач;

Виды контроля:

- текущий – зачет (2 семестр);
- итоговый – в рамках государственного экзамена (8 семестр).

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт органического синтеза им.И.Я. Пастовского
Уральского отделения Российской академии наук
(ИОС УрО РАН)

ОДОБРЕНО

Ученым советом
ИОС УрО РАН
«22» апреля 2015 г.
Протокол № 6

УТВЕРЖДАЮ

Директор ИОС УрО РАН
академик РАН _____ В.Н. Чарушин
«22» апреля 2015 г.
Приказ № 27-2

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Хемоинформатика

Шифр и название направления подготовки **18.06.01 Химическая технология**

Направленность **05.17.04 Технология органических веществ**

Квалификация: **«Исследователь. Преподаватель-исследователь»**

Форма обучения: **Очная (Заочная)**

Статус дисциплины:

Блок Б 1. «Дисциплины (модули)». Вариативная часть

Программа дисциплины составлена на основании федерального государственного образовательного стандарта к основной образовательной программе высшего образования – программе подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению 18.06.01 Химическая технология, утвержденного приказом Минобрнауки России от 30.07.2014 № 883.

АННОТАЦИЯ ПРОГРАММЫ

Программа предназначена для аспирантов, обучающихся по образовательным программам высшего образования – программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом.

Дисциплина «Хемоинформатика» относится к вариативной части Блока 1 «Дисциплины (модули)» ООП аспирантуры и является дисциплиной, обязательной для освоения по программе аспирантуры.

Рабочая программа соответствует:

- паспорту научной специальности 05.17.04 (направленность Технология органических веществ);

- учебному плану по ООП аспирантуры ИОС УрО РАН.

Освоение дисциплины осуществляется на первом курсе (1-2 семестры) обучения в соответствии с графиком учебного процесса.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е. (144 час.), в том числе:

- аудиторная работа - 2,0 з.е. (72 ч), представлена лекционными – 0,5 з.е. (18 ч) и лабораторными – 1,5 з.е. (54 ч) занятиями;

- самостоятельная деятельность аспиранта - 2,0 з.е. (72 ч).

Цель изучения дисциплины – формирование у аспирантов понимания необходимости знания о современных компьютерных системах автоматизации научных исследований (АСНИ), проектирования (САПР) и управления (АСУ), в том числе химико-технологическими процессами.

Задачи дисциплины – сформировать у аспирантов способность и готовность самостоятельно использовать математическое моделирование и информационные технологии в профессиональной деятельности, в том числе, для приобретения новых знаний и умений, при эксплуатации современного оборудования и приборов, при создании новых материалов и технологических процессов.

Систематизирование материала по дисциплине происходит в рамках шести разделов:

- Введение;
- Презентация и компьютерная манипуляция молекулярных структур;
- Молекулярные дескрипторы;
- Расчетные методы количественной зависимости структура – активность (свойство) QSAR/QSPR;
- Корпоративные информационные системы управления предприятием;
- Использование информационных технологий для решения типовых инженерно-экологических и управленческих задач;

Виды контроля:

- текущий – зачет (2 семестр);

- итоговый – в рамках государственного экзамена (8 семестр).

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель изучения дисциплины – формирование у аспирантов:

- понимания необходимости знания о современных аппаратных и программных средствах и использования этих знаний в управленческой и исследовательской деятельности;

- основных понятий, принципов построения, состава функциональных модулей информационных систем управления и исследования;

- понимания иерархической структуры и принципов функционирования компьютерных систем автоматизации научных исследований (АСНИ), автоматизированного проектирования (САПР), автоматизированного управления (АСУ);

- основ современной методологии решения типовых управленческих и исследовательских задач для различных уровней химико-технологической систем с использованием пакетов прикладных программ.

Задачи дисциплины – Сформировать у аспирантов способность и готовность самостоятельно использовать математическое моделирование и информационные технологии в профессиональной деятельности, в том числе:

- приобретать с помощью информационных технологий и использовать в практической деятельности новые знания и умения;

- эксплуатировать современное оборудование и приборы в соответствии с направлением и профилем подготовки;

- использовать методы математического моделирования для создания материалов и технологических процессов, в теоретическом анализе и экспериментальной проверке теоретических гипотез;

- строить и использовать модели для описания прогнозирования различных явлений, осуществить их качественный и количественный анализ;

- использовать пакеты прикладных программ при выполнении проектных работ;

- применять современные компьютерно-информационные технологии для сбора, анализа и оценки новейших научных и технологических разработок с целью внедрения в технологический, образовательный и научный процессы.

2. ТРЕБОВАНИЯ К УРОВНЮ ПОДГОТОВКИ АСПИРАНТА, ЗАВЕРШИВШЕГО ИЗУЧЕНИЕ ДАННОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

2.1 Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины:

- готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языке (УК-4)

- владение культурой научного исследования в области химической технологии, в том числе с использованием новых информационно-коммуникационных технологий (ОПК-2)

- способность к организации и самостоятельному проведению научно-исследовательской работы с получением научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям в избранной области (ПК-1).

2.2. Требования к результатам освоения дисциплины:

В результате освоения дисциплины аспирант должен

знать:

- методы и технологии научной коммуникации

- современные способы использования информационно-коммуникационных технологий (ИКТ) в выбранной сфере деятельности

- современное состояние науки в области технологии органических веществ;

уметь:

- выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования;

владеть:

- различными методами, технологиями и типами коммуникаций при осуществлении профессиональной деятельности
- навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов
- методами планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных данных, формулировки выводов и рекомендаций по направленности (специальности) подготовки.

3 СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

3.1 ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ И КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Виды учебной работы и контроля	Трудоемкость, час/з.е.				
	Всего	По учебным семестрам			
		1	2	6	7
Аудиторные занятия:	72/2.0	36/1.0	36/1.0	-	-
Лекции	18/0.5	18/0.5	-	-	-
Практические занятия	-	-	-	-	-
Лабораторные занятия	54/1.5	18/0.5	36/1.0	-	-
Самостоятельная работа студентов:	72/2.0	36/1.0	36/1.0	-	-
Подготовка к практическим занятиям	-	-	-	-	-
Подготовка реферата	-	-	-	-	-
Изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку	72/2.0	36/1.0	36/1.0		
Вид контроля:	-	-	-		
Текущий	-	-	Зачет		
Промежуточный	-	-	-	-	-
Итоговый	-	-	-		ГИЭ
Общая трудоемкость по учебному плану	144/4.0	72/2.0	72/2.0		

3.2 РАЗДЕЛЫ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ ЗАНЯТИЙ

№ п/п	Название раздела дисциплины	Объем учебной нагрузки, час				
		Всего	Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия	Самостоятельная работа
1	Введение	1	1	0	0	0
2	Презентация и компьютерная манипуляция молекулярных структур	26	4	0	12	10

3	Молекулярные дескрипторы	26	4	0	12	10
4	Расчетные методы количественной зависимости структура – активность (свойство) QSAR/QSPR	54	4	0	18	32
5	Корпоративные информационные системы управления предприятием	19	3	0	6	10
6	Использование информационных технологий для решения типовых инженерно-экологических и управленческих задач	18	2	0	6	10
7	Итого(час/з.е.)	144/ 4	18/0.5	-	54/1.5	72/2.0

3.3 СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛОВ ЛЕКЦИОННОГО КУРСА

Введение

История применения компьютерных технологий в химии и химической технологии

Презентация и компьютерная манипуляция молекулярных структур

Принципы представления химических структур в компьютерном виде. Линейное, табличное представления, Международные стандарты представления молекул: mol, sdf, rdf, cif, pdb, InChI? InChI-Key. Алгоритм Моргана.

Молекулярные дескрипторы

Типы молекулярных дескрипторов: элементарные, физико-химические, топологические, электронные, геометрические и химические дескрипторы.

Расчетные методы количественной зависимости структура – активность (свойство) QSAR/QSPR

Основные примеры вычислительных методов и программ, используемых для направленного молекулярного дизайна лекарств.

Корпоративные информационные системы управления предприятием

Международные стандарты управления MRP II и ERP и др. Корпоративные информационные системы (1С:Предприятие, БОСС Корпорация, Галактика, Cyteline, Oracle Application, Ваан, R/3 и др.). Использование Интернет/Инtranet технологии для реализации модуля оперативного управления. Полнофункциональное представительство предприятия в Интернете. Интегрированные пакеты для офиса. Пакеты прикладных программ организации документооборота. Пакеты прикладных программ для математического анализа данных.

Использование информационных технологий для решения типовых инженерно-экологических и управленческих задач

Понятие химико-технологической системы (ХТС). Типовые задачи уровня ХТС - химический комбинат, химический завод. Расчеты критериев инженерно-эколого-экономической эффективности производственных процессов и технологий. Компьютерные программы, реализующие эмпирический подход к компьютерному синтезу: LHASA (Logic and Heuristic Applied to Synthetic Analysis), SECS (Simulation and

Evaluation of Chemical Synthesis), REACT (REACTION path synthesis program for the petrochemical industry), SynGen (SYNthesis GENERation), SYNCHEM (SYNthetic CHEMistry), WODCA (Workbench for the Organization of Data for Chemical Applications), EROS (Elaboration of Reactions for Organic Synthesis), TOSCA (Topological Synthesis design by Computer Application).

3.4 ПРАКТИЧЕСКИЕ (СЕМИНАРСКИЕ) ЗАНЯТИЯ – НЕ ПРЕДУСМОТРЕНЫ

3.5. ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

Раздел, тема дисциплины	Наименование лабораторной работы	Объем учебного времени, час / з.е.
Презентация и компьютерная манипуляция молекулярных структур	Презентация структур и реакций в системе SMILES и SMARTS	6 / 0.16
Равновесие и скорость реакции	Презентация структур в системе WLN и InChI	6 / 0.17
Молекулярные дескрипторы	Расчет электронных дескрипторов с использованием программ квантово-химических расчетов	6 / 0.17
Молекулярные дескрипторы	Расчет топологических дескрипторов	6 / 0.17
Расчетные методы количественной зависимости структура – активность (свойство) QSAR/QSPR.	Построение модели QSAR для биологической активности	9 / 0.25
Расчетные методы количественной зависимости структура – активность (свойство) QSAR/QSPR.	Проверка модели QSAR	9 / 0.25
Корпоративные информационные системы управления предприятием	Поиск научной и технической информации в Интернете	6 / 0.17
Использование информационных технологий для решения типовых инженерно-экологических и управленческих задач.	Расчеты критериев инженерно-эколого-экономической эффективности производственных процессов и технологий	6 / 0.16
Итого		54 / 1.5

3.6. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Изучение учебного материала, перенесенного с аудиторных занятий на самостоятельную проработку.

Выявление информационных ресурсов в научных библиотеках и сети Internet по следующим направлениям:

- библиография по проблемам строения и реакционной способности органических соединений;
- публикации (в том числе электронные) источников по проблемам строения и реакционной способности органических соединений;

- научно-исследовательская литература по актуальным проблемам строения и реакционной способности органических соединений;
Конспектирование и реферирование первоисточников и научно-исследовательской литературы по тематическим блокам.

3.7 КОНТРОЛЬНЫЕ РАБОТЫ – НЕ ПРЕДУСМОТРЕНЫ.

3.8 СПИСОК ВОПРОСОВ ДЛЯ ПРОМЕЖУТОЧНОГО ТЕСТИРОВАНИЯ – НЕ ПРЕДУСМОТРЕНЫ.

3.9 ТЕМАТИКА РЕФЕРАТОВ – НЕ ПРЕДУСМОТРЕНА.

3.10 АКТИВНЫЕ МЕТОДЫ ОБУЧЕНИЯ (ДЕЛОВЫЕ ИГРЫ, НАУЧНЫЕ ПРОЕКТЫ) - НЕ ПРЕДУСМОТРЕНЫ.

4 ОРГАНИЗАЦИЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1 ТЕКУЩИЙ КОНТРОЛЬ - в рамках собеседования по итогам освоения программы дисциплины, зачет.

4.2 ПРОМЕЖУТОЧНЫЙ КОНТРОЛЬ - НЕ ПРЕДУСМОТРЕН.

4.3 ИТОГОВЫЙ КОНТРОЛЬ – в рамках государственного итогового экзамена.

5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

При текущем контроле применяется система «зачтено/не зачтено» с учетом критериев, представленных в табл.:

Оценка	Критерии
Зачтено	Аспирант показал творческое отношение к обучению, в совершенстве или в достаточной степени овладел знаниями, показал все (как минимум основные) требуемые умения и навыки
Не зачтено	Аспирант не владеет основными умениями и навыками

Оценка уровня знаний при итоговом контроле осуществляется в соответствии с положением о Государственной итоговой аттестации.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

6.1 СПИСОК ОСНОВНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Введение в хемоинформатику. Серия учебных пособий (в 5 ч.). Т.И. Маджидов и др. – Казань, издательство Казанского университета, 2013-2017.
Часть 1. Компьютерное представление химических структур / Т.И. Маджидов, И.И. Баскин, И.С. Антипин, А.А. Варнек. - Казань: Изд. Казанского университета, 2013. - 174 с.
Часть 2. Химические базы данных / Т.И. Маджидов, И.И. Баскин, И.С. Варнек. - Казань: Изд. Казанского университета, 2015. - 188 с.
Часть 3. Моделирование «структура-свойство» / И.И. Баскин, Т.И. Маджидов, А.А. Варнек. - Казань: Изд. Казанского университета, 2015. - 304 с.
Часть 4. Методы машинного обучения / И.И. Баскин, Т.И. Маджидов, А.А. Варнек. - Казань: Изд. Казанского университета, 2016. - 330 с.
Часть 5. Информатика химических реакций / И.И. Баскин, Т.И. Маджидов, А.А. Варнек. - Казань: Изд. Казанского университета, 2017. – 244 с.
2. Молекулярное моделирование: теория и практика / Х. -Д. Хельтье и др. / М.: БИНОМ.

Лаборатория знаний, 2009. - 318 с. - Пер. изд. : Molecular Modeling. Basic Principles and Applications. - Weinheim, 2008. - ISBN 978-5-9963-0156-0

3. A.R. Leach, V.L. Gillet. An Introduction to Chemoinformatics. Berlin: Springer, 2007. 250 p.
4. Ramachandran, K. I. Computational Chemistry and Molecular Modeling. Principles and Applications : монография / К. I. Ramachandran, G. Deera, K. Namboori. - Berlin : Springer, 2008. - XXI, 397 p. : ил. - Библиогр. в конце глав. - Указ.: с. 391-397. - ISBN 978-3-540-77302-3 : 3167.00 p.
5. Chemoinformatics. Advanced Control and Computational Techniques / ed. H. G. Gilani, K. G. Samper, R. K. Naghi. - New York : Apple Academic Press, 2013. - VIII, 204 p. - ISBN 978-1-926895-23-9 :
6. Леск, А. Введение в биоинформатику / - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. - 318 с. - Пер. изд. : Introduction to bioinformatics / А. М. Lesk. - Oxford, 2002. - ISBN 978-5-94774-501-6

6.2. ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Tutorials in Chemoinformatics. / Ed. Alexandre Varnek - Wiley-VCH. 2017, 482 p. ISBN: 978-1-119-13796-2
2. J. Gasteiger, T. Engel. Chemoinformatics/ Berlin. Springer, 2003. 649 p.
3. Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров / отв. ред. В. А. Иванов, А. Л. Рабинович, А. Р. Хохлов. - М. : Книжный дом "ЛИБРОКОМ", 2009. - 662 с. ISBN 978-5-397-01119-8.
4. Френкель, Даан. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем: от алгоритмов к приложениям / М. : Научный мир, 2013. - 559 с. - Пер. изд. : Understanding molecular simulation. From Algorithms to Applications / D. Frenkel, B. Smit. - Boston [et al.], 2002. - ISBN 978-5-91522-223-5.
5. Структура и функционирование белков. Применение методов биоинформатики / под ред., пер. с англ. В. Н. Новоселецкий ; пер. с англ. Е. Д. Балицкой, пер. Т. В. Науменковой. - М. : Ленанд, 2014. - 414 с. ISBN 978-5-9710-0842-2.
6. Schlick, Tamar. Molecular Modeling and Simulation. An Interdisciplinary Guide / New York [et al.]: Springer-Verlag, 2002. 634 p. ISBN 0-387-95404-X : 2680.00 p.
7. Бейдер, Ричард. Атомы в молекулах: квантовая теория / М.: Мир, 2001. - 532 с. ISBN 5-03-003363-7.
8. Chemoinformatics for Drug Discovery : сборник / ed. by J. Vajorath. - Hoboken [et al.] : John Wiley & Sons, 2014. ISBN 978-1-118-13910-3.
9. Brereton, Richard G. Chemometrics. Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant / R. G. Brereton. - Chichester : WILEY, 2003. ISBN 0-471-48977-8.
10. The Handbook of Environmental Chemistry / With contributions by T. E. Barnard etc.; Ed. by O. Hutzinger. - Berlin etc. : Springer-Verlag, 1995. Vol. 2, pt. G : Chemometrics in Environmental Chemistry. Statistical Methods : ISBN 3-540-58941-4. ISBN 0-387-58941-4. ISBN 0-387-58941-4.
11. Шараф, Мухаммад А. Хемометрика / Л.: Химия. Ленинградское отделение, 1989. - 269 с. - ISBN 5-7245-0361-1. Пер. изд.: Chemometrics/ М. А. Sharaf etc.- New York etc., 1986.
12. Померанцев, Алексей Л. Хемометрика в Excel : учеб. пособие для вузов / Томск : Изд-во Томского политехнического университета, 2014. - 434 с. + 1 эл. опт. диск. ISBN 978-5-4387-0374-7.
13. Плас, Дж. Вандер. Python для сложных задач наука о данных: и машинное обучение : монография / Санкт-Петербург [и др.] : Питер, 2018. - 572 с. Пер. изд. : Python Data Science Handbook. Essential Tools for Working with Data / J. V. Plas. - Beijing [et al.], 2017. - ISBN 978-5-496-03068-7.

14. Мюллер, Андреас. Введение в машинное обучение с помощью Python / Москва [и др.] : Диалектика, 2017. - 472 с. Пер. изд. : Introduction to Machine Learning with Python / A. C. Muller, S. Guido. - Beijing [et al.], 2017. - ISBN 978-5-9908910-8-1.
15. О.А.Раевский. Моделирование соотношений «структура-свойство». – М.: «Добросвет», издательство «КДУ», 2015, - 288 с.
16. Р. Дурбин, Ш. Эдди, А. Крог, Г. Митчисон. Анализ биологических последовательностей. – М.- Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, 2006. – 480 с.
17. М. Бордовский, С. Екишева. Задачи и решения по анализу биологических последовательностей. – М.- Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, 2008. – 440 с.
18. Дж. Уокенбах. Microsoft Excel 2007: профессиональное программирование на VBA. М.: ООО «И.Д. Вильямс», 2008. – 928 с.
19. Handbook of Chemoinformatics / Ed. J. Gasteiger. – Weinheim: Wiley-VCH, 2003
20. Chemoinformatics: A Textbook / Ed. J. Gasteiger, T. Engel. – Verlag: Wiley-VCH, 2003
21. Handbook of Molecular Descriptors / R. Todeschini, V. Consonni. - Weinheim-New York:Wiley-VCH, 2000
22. QSAR: Hansch Analysis and Related Approaches / H. Kubinyi. – Weinheim-New York: VCH, 1993

6.3 УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Не предусмотрены

6.4 ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ И ИНТЕРНЕТ-РЕСУРСЫ

Программы пакета Microsoft Office;

Информационные сервисы: Sciencedirect, Elibrary, Chemtube3D.

Электронные ресурсы Центральной научной библиотеки (ЦНБ) УрО РАН (30 точек доступа) - <http://cnb.uran.ru/>

Пакеты программ:

- ChemOffice

- ISISDraw

- MS Office

- ChemCad

<http://www.scopus.com> – База данных по научным публикациям

http://www.talete.mi.it/dragon_net.htm - программа расчета молекулярных

дескрипторов

<http://www.citforum.ru> – Сервер информационных технологий.

<http://www.osp.ru> – Издательство “Открытые системы”.

<http://www.softlist.ru> – Каталог программ российских разработчиков.

<http://www.microsoft.com/rus> – Сайт корпорации Microsoft в России.

<http://www.oracle.ru> – Сайт корпорации ORACLE в России.

<http://www.oramag.ru> –Электронный журнал об ORACLE.

<http://www.e-commerce.ru> –Информационно-консалтинговый центр по электронной коммерции.

<http://www.mags.ru> – Электронная коммерция.

<http://www.russianenterprisesolutions.com> – Планета КИС (Корпоративные информационные системы управления)

<http://www.statsoft.ru> – Статистический портал.

<http://www.exponenta.ru> – Образовательный математический сайт.

<http://www2.chemie.uni-erlangen.de/software/eros/> - Портал компьютерного дизайна органических реакций

<http://www.bioinformatix.ru/> - Портал биоинформатики

<http://www.scopus.com> – База данных по научным публикациям

www.reaxys.com - База Beilstein и Gmelin
<http://www.bioinformatix.ru/> - Портал биоинформатики

7. МАТЕРИАЛЬНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (*Современные приборы, установки (стенды), необходимость специализированных лабораторий и классов*)

Институт располагает специально оборудованным помещением для проведения лекционных занятий.

В институте:

- создана локальная сеть, объединяющая 100 компьютеров, с выходом в Интернет;
- внедрена система корпоративной электронной почты на основе MS Exchange 2003, с возможностью удаленного доступа;
- предоставлены для пользования принтеры, сканеры и ксероксы, что способствует эффективной самостоятельной деятельности аспирантов при освоении дисциплины.

