



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ФГБОУ ВО «ИГУ»
Кафедра физической и коллоидной химии

УТВЕРЖДАЮ
Декан химического факультета, доц.
А.И. Вильмс
«17» мая 2021 г.

Рабочая программа дисциплины

Наименование дисциплины **Б1.В.08, ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ**

Направление подготовки **04.04.01 - Химия**

Направленность подготовки (профиль): **Научно-технологический**

Квалификация выпускника – **магистр**

Форма обучения **очная**

Согласовано с УМК_химического факультета

Протокол № 6 от «17» мая 2021 г.

Председатель А.И. Вильмс

Рекомендовано кафедрой физической и коллоидной химии:

Протокол № 6 от «12» мая 2021 г.

Зав. кафедрой Шмидт А.Ф.

Иркутск 2021 г.

Содержание

	стр.
I. Цели и задачи дисциплины (модуля)	3
II. Место дисциплины в структуре АОПОП.	3
III. Требования к результатам освоения дисциплины	3
IV. Содержание и структура дисциплины	4
4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов	4
4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	8
4.3 Содержание учебного материала	9
4.3.1 Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ	11
4.3.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение в рамках самостоятельной работы студентов	12
4.4. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов	12
4.5. Примерная тематика курсовых работ (проектов)	12
V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)	12
а) перечень литературы	12
б) периодические издания	12
в) список авторских методических разработок	13
г) базы данных, поисково-справочные и информационные системы	13
VI. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)	14
6.1. Учебно-лабораторное оборудование:	
6.2. Программное обеспечение:	
6.3. Технические и электронные средства обучения:	
VII. Образовательные технологии	15
VIII. Оценочные материалы для текущего контроля и промежуточной аттестации	15

I. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ:

Цель: подготовка магистров к проведению научных исследований в области химии с применением современных информационных технологий для получения и обработки данных.

Задачи:

формирование навыков поиска и анализа научной информации с помощью современных наукометрических баз данных;

формирование навыков поиска информации о веществах с помощью современных справочных, спектроскопических и кристаллографических баз данных;

овладение способами обработки и анализа получаемых в ходе исследований физико-химических экспериментальных данных с применением современного программного обеспечения;

II. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ АОПОП ВО

2.1. Учебная дисциплина «Информационные технологии в химических исследованиях» относится к дисциплинам вариативной части профессионального цикла (Б1.В.08).

2.2. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими дисциплинами (на предыдущем уровне образования в бакалавриате), а именно:

«Математика» (Б1.О.10), «Информатика» (Б1.О.21), «Информатика и вычислительная техника» (Б1.О.22), «Основы научно-исследовательской деятельности» (Б1.О.01), «Работа с химической литературой и информационный поиск» (Б1.В.11).

2.3. Перечень последующих учебных дисциплин, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной:

«Научно-исследовательская работа» (Б2.В.03(Н)), выполнения выпускных квалификационных работ и формирования профессиональных компетенций.

III. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование компетенций (элементов следующих компетенций) в соответствии с ФГОС ВО и АОП ВО по данному направлению подготовки 04.04.01 «Химия», профиль: научно-технологический.

Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с индикаторами достижения компетенций

Компетенция	Индикаторы компетенций	Результаты обучения
ПК-2 Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	<i>ИДК ПК-2.1</i> Проводит поиск специализированной информации в патентно-информационных базах данных	Знать: - методы анализа научных данных; Владеть: - навыками организации сбора и изучения научно-технической информации в выбранной области химии.

IV. СОДЕРЖАНИЕ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Объем дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 часа,

Из них 36 часов – практическая подготовка

Форма промежуточной аттестации: зачет

4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов

№ п/п	Раздел дисциплины/тема		Всего часов	Из них практическая подготовка обучающихся	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся, практическую подготовку и трудоемкость (в часах)				Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточно й аттестации (по семестрам)	
					Контактная работа преподавателя с обучающимися			Самостоятельная работа + КО		
					Лекции	Семинарские/ практические/ лабораторные занятия	Консультации + КСР			
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	
1	Введение	2	2	0	2	0	0	0	0	Устная беседа
2	Работа с современными библиографическими базами данных	2	8,5	4	2	4	0,5	2	2	Устная беседа, проверка практических работ
3	Сбор и обработка данных физико-химических	2	9,5	5	2	5	0,5	2	2	Устная беседа,

	методов в химических исследованиях (УФ-спектроскопия, хромато-масс-спектрометрия)								проверка практических работ
4	Программное обеспечения для управления библиографической информацией	2	8	4	2	4	0	2	Устная беседа, проверка практических работ
5	Программное обеспечение для хранения, обработки и визуализации данных химических экспериментов	2	10	6	2	6	0	2	Устная беседа, проверка практических работ
6	Способы условного отображения химического вещества.	2	9	5	2	5	0	2	Устная беседа, проверка практических работ
7	Справочные, спектральные и кристаллографические базы данных и работа с ними.	2	8,5	4	2	4	0,5	2	Устная беседа, проверка практических работ
8	Количественный анализ данных ПЭМ и ПЭМ ВР изображений наноразмерных систем	2	8	4	2	4	0	2	Устная беседа, проверка практических работ
9	Качественный и количественный анализ дифракционных данных, получаемых с помощью ПЭ микроскопии.	2	8,5	4	2	4	0,5	2	Устная беседа, проверка практических работ
Итого часов		2	72	36	18	36	2	16	Зачет

4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
2	3. Работа с современными библиографическими базами данных	Выполнение практических заданий		2	УО, ПЗ	-
2	4. Сбор и обработка экспериментальных данных, полученных с использованием метода хромато-масс-спектрометрии	Работа с литературой. Выполнение практических заданий		2	УО, ПЗ	№№ 1,2 в списке дополнительной литературы
2	Программное обеспечения для управления библиографической информацией	Работа с литературой. Выполнение практических заданий.		2	УО, ПЗ	
2	Программное обеспечение для хранения, обработки и визуализации данных химических экспериментов	Выполнение практических заданий		2	УО, ПЗ	
2	Способы условного отображения химического вещества в форме текстовой строки. Двумерное и трехмерное отображение химической структуры.	Выполнение практических заданий.		2	УО, ПЗ	№ 1 в списке основной литературы раздела V.

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
2	Справочные, спектральные (ЯМР, ИК, масс) и кристаллографические базы данных.	Выполнение практических заданий		2	УО, ПЗ	№ 3-9 в списке «базы данных, информационно-справочные и поисковые системы» раздела V.
2	Количественный анализ данных ПЭМ и ПЭМ ВР изображений наноразмерных систем	Выполнение практических заданий		2	УО, ПЗ	№ 6 в списке доп. литературы
2	Качественный и количественный анализ дифракционных данных, получаемых с помощью ПЭ микроскопии.	Выполнение практических заданий		2	УО, ПЗ	№ 6 в списке доп. литературы
Общий объем самостоятельной работы по дисциплине (час)				16		

4.3 Содержание учебного материала

Содержание разделов и тем дисциплины

Введение. (2 ч.)

Цель и задачи курса.

1. Работа с современными библиографическими базами данных (2 ч)

Современные реферативные базы как средства поиска и анализа научной и научно-технической информации. Обзор функциональных возможностей. Основные типы поисковых запросов. Работа с сайтами издательств научных журналов. Инструменты для систематизации научной литературы.

2. Сбор и обработка экспериментальных данных, полученных с использованием метода хромато-масс-спектрометрии (2 ч)

Применение хромато-масс-спектрометрического анализа в решении исследовательских задач в области каталитических реакций. Обработка экспериментальных данных для получения качественных и количественных данных о составе реакционной смеси. Анализ возможностей программного обеспечения GCMS Solution (Shimadzu corp.). Принципы планирования экспериментов с применением рассматриваемого метода. Возможности комплексных исследований с его использованием.

3. Программное обеспечение для управления библиографической информацией

Системы управления библиографическими базами данных JabRef, EndNote, Mendeley, Zotero. Библиографические менеджеры JabRef, Mendeley, Zotero, как средство создания собственных библиографических БД. Интеграция этих программных продуктов с онлайн-поисковыми системами и каталогами библиотек.

4. Программное обеспечение для хранения, обработки и визуализации данных химических экспериментов

Программное обеспечение для анализа и визуализации научных данных Origin, LabPlot, SciDavis, MS Excel, LibreOffice Calc и их применение в химических исследованиях. Электронные лабораторные журналы, обзор некоторых решений: Open inventory, sciNote, Chemotion ELN.

5. Способы условного отображения химического вещества (2 ч)

Способы отображения химических веществ и их применение. Одномерное (строчное, линейное) описание соединений. Химические формулы. Порядок размещения атомов в брутто-формулах химических веществ по системе Хилла. Линейные нотации. Регистрационные номера химических веществ, используемые в больших базах данных. CAS Registry Number: алгоритм нумерации химических объектов, формат записи. Линейные нотации SMILES. Основные правила формулирования кода SMILES и средства его генерирования. Использование SMILES в информационном поиске. Международный химический идентификатор InChI. Общее представление о формате кода InChI. Понятие об InChIKey. Использование InChI и InChIKey в информационном поиске. Двумерное описание соединений. Типы структурных формул (2D). Молекулярный редактор. Апплет. Трехмерное описание соединений. Генерация и визуализация 3D структур.

6. Справочные, спектральные и кристаллографические базы данных и работа с ними (2 ч)

Информационно-поисковая система. Базы данных и их типы. Справочные базы данных. База данных NIST Chemistry WebBook и работа с ней. Справочник по термодинамическим и термодинамическим свойствам веществ и ионов «Термодинамические константы веществ». Графическое отображение ЯМР-, ИК-, масс-спектров. Комплекс баз данных RIO-DB Национального института современной промышленной науки и технологии (AIST, Япония). Спектроскопические ресурсы RIO-DB. Методика извлечения спектральной информации (ЯМР-, масс-, ИК-спектров) из базы данных SDBS. ChemSpider как онлайн-центр структурной информации. Базы данных ChemIDplus и ChemSynthesis. Структура поискового бланка. Кристаллографическая информация в онлайн-научных журналах. Онлайн-архивы CIF-файлов. Работа с базой данных COD. Прикладные программы визуализации и анализа информации, хранящейся в CIF-файлах. Приемы работы с ними на примере программы Mercury.

7. Количественный анализ данных ПЭМ и ПЭМ ВР изображений наноразмерных систем

Расчет количественных характеристик нанобъектов с использованием программного обеспечения различных компаний. Построение диаграмм распределения частиц наносистем по размерам.

8. Качественный и количественный анализ дифракционных данных, получаемых с помощью ПЭ микроскопии.

Дифракционные картины, получаемые для наносистем на просвечивающих электронных микроскопах. Качественная идентификация компонентов наносистем по их дифракционным картинам.

4.3.1 Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ

№ п/н	№ Раздела и темы	Наименование семинаров, практических и лабораторных работ	Трудоемкость (час.)		Оценочные средства	Формируемые компетенции (индикаторы)*
			Всего часов	Из них практическая подготовка		
1	2	3	4	5	6	7
1	1. Работа с современными библиографическими базами данных	Поиск и анализ информационных источников по теме научных исследований	4	4	ПЗ	ПК-2.1 Знает: возможности современных метрических баз данных для анализа полученных результатов; Владеет навыками анализа информации, найденной с

						использовани ем современ- ных науко- метрических баз данных
2	2. Сбор и обработка экспериментальных данных, полученных с использованием метода хромато-масс-спектрометрии	Установление состава и строения компонентов реакционной смеси на основании данных хромато-масс-спектрометрического анализа	5	5	ПЗ	ПК-2.1 Умеет: обрабаты- вать данные хромато- масс- спектромет- рического анализа; Владеет навыками установле- ния качествен- ного и количест- венного состава смесей органичес- ких соединений на основании данных хромато- масс- спектромет- рического анализа.
3	3 Программное обеспечения для управления библиографической информацией	Применение библиографическо го менеджера Mendeley для систематизации библиографически х данных и подготовке научных публикаций, отчетов и квалификационны х работ	4		ПЗ	ПК-2.1
4	4 Программное обеспечение для хранения, обработки и визуализации данных химических экспериментов	Применение программных продуктов LabPlot, SciDavis, MS Excel, LibreOffice Calc для анализа и визуализации научных данных в химических	6		ПЗ	ПК-2.1

		исследованиях.				
5	5 Способы условного отображения химического вещества.	Линейные нотации: Составление кода SMILES. Поиск по кодам. Визуализация молекулярных структур.	5	5	ПЗ	ПК-2.1
6	6 Справочные, спектральные и кристаллографические базы данных и работа с ними.	Практическая работа в справочных базах данных, а также в базах ЯМР, ИК-спектроскопии и РСА.	4	4	ПЗ	ПК-2.1
7	7 Количественный анализ данных ПЭМ и ПЭМ ВР изображений наносистем	Количественный анализ данных ПЭМ и ПЭМ ВР изображений наносистем	4	4	ПЗ	ПК-2.1
8	8 Качественный и количественный анализ дифракционных данных, получаемых с помощью ПЭ микрокопии.	Качественный и количественный анализ дифракционных данных, получаемых с помощью ПЭ микрокопии.	4	4	ПЗ	ПК-2.1

4.3.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение в рамках самостоятельной работы студентов

№ п/н	Тема*	Задание	Формируемая компетенция	ИДК
1	2	3	4	5
1				
2...				

4.4 Методические указания по организации самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа студентов, связанная с закреплением теоретического материала в виде выполнения практических заданий, проводится во внеаудиторное время

Организация самостоятельной работы студента представлена в методических рекомендациях по организации самостоятельной работы студента, подготовленных преподавателями кафедры.

4.5 Примерная тематика курсовых работ (проектов) (при наличии) нет

V. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

а) перечень литературы

основная литература

1. Введение в информационный поиск [Текст] : научное издание / К. Д. Маннинг, П. Рагхаван, Х. Шютце ; пер. с англ. Д. А. Ключин. - М. : Вильямс, 2014. - 520 с. ; 24 см. - Библиогр.: с. 473-505. - ISBN 978-5-8459-1623-5 : 1394.80 р.+

дополнительная литература

1. Информатика и информационные технологии [Текст] : учеб. пособие / ред. Ю. Д. Романова. - 5-е изд., испр. и доп. - М. : Эксмо, 2011. - 794 с. : ISBN 978-5-699-35357-6.+
2. Введение в нанотехнологию [Текст] = Nano technology : научное издание / Н. Кобаяси ; Пер. с яп. А. В. Хачояна под ред. Л. Н. Патрикеева. - М. : Бином. Лаборатория знаний, 2005. - 135 с. : ил. ; 21 см. - (Нанотехнология). - ISBN 5-94774-218-7.



б) периодические издания (при необходимости)

1. K.A. Badiola, C. Bird, W.S. Brocklesby, J. Casson, R.T. Chapman, S.J. Coles, et al., Experiences with a researcher-centric ELN, Chem. Sci. 6 (2015) 1614–1629. Doi:10.1039/c4sc02128b. [электронный ресурс: открытый доступ]
2. P. Tremouilhac, A. Nguyen, Y.C. Huang, S. Kotov, D.S. Lütjohann, F. Hübsch, et al., Chemotion ELN: An Open Source electronic lab notebook for chemists in academia, J. Cheminform. 9 (2017) 1–23. Doi:10.1186/s13321-017-0240-0. [электронный ресурс: открытый доступ]
3. S. Kanza, C. Willoughby, N. Gibbins, R. Whitby, J.G. Frey, J. Erjavec, et al., Electronic lab notebooks: can they replace paper?, J. Cheminform. 9 (2017) 1–15. DOI: 10.1186/s13321-017-0221-3. [электронный ресурс: открытый доступ]
4. J.M. Morán, A. Santillán-García, I. Herrera-Peco. SCRUTATIOM: how to detect retracted literature included in systematics reviews and metaanalysis using SCOPUS© and ZOTERO©, Gaceta Sanitaria 36 (2020) 64-661. DOI: 10.1016/j.gaceta.2020.06.012. [электронный ресурс: открытый доступ]
5. T. Digby. Developing a Minimalist Multilingual Full-text Digital Library Solution for Disconnected Remote Library Partners. Information Technology and Libraries 4 (2021) 1-9. DOI: 10.6017/ital.v40i4.13319 [электронный ресурс: открытый доступ]
6. Chen P-Y, Hayes E, Larivière V, Sugimoto CR Social reference managers and their users: A survey of demographics and ideologies. PLoS ONE 13 (2018) e0198033. DOI: 10.1371/journal.pone.0198033 [электронный ресурс: открытый доступ]
7. J. Kratochvíl. Comparison of the Accuracy of Bibliographical References Generated for Medical Citation Styles by EndNote, Mendeley, RefWorks and Zotero. The Journal of Academic Librarianship 43 (2017) 57-66. DOI: 10.1016/j.acalib.2016.09.001 [электронный ресурс: открытый доступ].

8. L.Waltman. A review of the literature on citation impact indicators, *Journal of Informetrics* 10 (2016) 365-391 DOI: 10.1016/ 10.1016/j.joi.2016.02.007 [электронный ресурс: открытый доступ].
9. A. Aghaei Chadegani, H. Salehi, M. Md Yunus, H. Farhadi, M. Fooladi, M. Farhadi, N. Ale Ebrahim. A comparison between two main academic literature collections: Web of science and Scopus databases, *Asian Social Science* 9 (2013) 18-26. DOI: 10.5539/ass.v9n5p18 [электронный ресурс: открытый доступ].
10. S. Alonso, F.J. Cabrerizo, E. Herrera-Viedma, F.Herrera. H-Index: A review focused in its variants, computation and standardization for different scientific fields, *Journal of Informetrics* 3 (2009) 273-289 DOI: 10.1016/j.joi.2009.04.001 [электронный ресурс: открытый доступ].

в) список авторских методических разработок:

в ЭИОС ИГУ размещены методические указания к организации самостоятельной работы студентов

г) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

1. Elibrary.ru - крупнейший российский информационно-аналитический портал в области науки, технологии, медицины и образования, содержащий рефераты и полные тексты более 38 млн научных публикаций и патентов.
 2. Scopus.com - реферативная база данных рецензируемой научной литературы, содержащая данные около 78 млн публикаций, около 10 млн докладов конференций и 44 млн патентов.
 3. <https://webbook.nist.gov/chemistry/> - обширная база данных со своей поисковой системой. Содержит справочник по физическим и термодинамическим свойствам органических и неорганических соединений.
 4. <http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tky.pl?show=welcome.html/welcome.html> – база данных "Термические константы веществ"
 5. <https://chem.nlm.nih.gov/chemidplus/> - справочная база данных, содержит сведения почти о 400 тыс. органических и (некоторых) неорганических соединений.
 6. <https://www.chemsynthesis.com/> - библиографическая база данных, обогащенная химическими структурами, с возможностью структурного поиска.
 7. <http://www.chemspider.com/> - справочная база данных, в которой собраны сведения о свойствах более 29 миллионов химических веществ.
 8. https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/cre_index.cgi – спектральная база данных.
 9. <http://www.crystallography.net/cod/> - кристаллографическая база данных
 10. <https://www.limswiki.org>
Данный ресурс представляет собой базу данных техническим решениям для организации электронных лабораторных журналов
 11. <https://www.mendeley.com>
Данный ресурс представляет собой веб-страницу, посвященную популярному менеджеру библиографических данных Mendeley.
 12. www.zotero.org. Данный ресурс представляет собой веб-страницу, посвященную популярному менеджеру библиографических данных Zotero.
- (перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет" (далее - сеть "Интернет"), необходимых для освоения дисциплины (модуля))*

VI.МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1. Учебно-лабораторное оборудование:

Помещения для проведения лекционных и практических занятий, укомплектованные необходимым оборудованием, а именно:

- аудитории, оснащенные мультимедийными средствами, для проведения аудиторных и практических занятий (ауд. 303, 402, 426); ауд. 5, 402, 426 оборудованы мультимедийными проекторами (InFocus IN 105 (3D Ready), настенными экранами, ноутбуками Samsung NP 300T5A-A0FRU.
- компьютерный класс кафедры физической и коллоидной химии (ауд. 303). Общее количество единиц вычислительной техники – 4.
- компьютерный класс химического факультета (ауд. 209). Общее количество единиц вычислительной техники – 11 шт. Имеется локальная сеть.

6.2. Программное обеспечение: GCMS Solution (Shimadzu corp., качественный и количественный анализ масс-спектров). «Сканирование» (ОКБ «Спектр», качественный и количественный анализ УФ-спектров). Программа для визуализации 3D кристаллических структур Mercury. Zotero — программа с открытым исходным кодом, позволяющая собирать цитаты с указанием источников, сохранять PDF-документы, веб-страницы

VII.ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В процессе изучения дисциплины «Информационные технологии в химических исследованиях» читаются лекции, проводятся практические занятия, на которых проводят выполнение практических заданий.

Активные формы обучения. На практических занятиях, которые составляют около двух третей от контактной работы, каждый студент самостоятельно выполняет задания на различные темы, участвует в дискуссионном разборе конкретных ситуаций. Такой вид организации обучения способствует закреплению практических навыков применения различных информационных инструментов и программного обеспечения для получения и обработки теоретической и экспериментальной химической информации.

VIII.ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

8.1. Оценочные материалы (ОМ):

Оценочные материалы текущего контроля формируются в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе университета. Назначение оценочных материалов текущего контроля - выявить у обучающихся сформированность компетенции ПК 2.1.

Материалы для проведения текущего и промежуточного контроля знаний студентов:

№ п/н	Вид контроля	Контролируемые темы (разделы)	Компетенции (компоненты), которые контролируются
1	2	3	4
1	Выполнение практических заданий. УО.	Работа с современными библиографическими базами данных.	ПК 2.1
2	Выполнение практических заданий. УО.	Сбор и обработка экспериментальных данных, полученных с использованием метода хромато-масс-спектрометрии	ПК 2.1
3	Выполнение практических заданий. УО.	Программное обеспечения для управления библиографической информацией	ПК 2.1
4	Выполнение практических заданий. УО.	Программное обеспечение для хранения, обработки и визуализации данных химических экспериментов	ПК 2.1
5	Выполнение практических заданий. УО.	Способы условного отображения химического вещества.	ПК 2.1
6	Выполнение практических заданий. УО.	Справочные, спектральные и кристаллографические базы данных и работа с ними.	ПК 2.1
7	Выполнение практических заданий. УО.	Количественный анализ данных ПЭМ и ПЭМ ВР изображений наноразмерных систем	ПК 2.1
8	Выполнение практических заданий. УО.	Качественный и количественный анализ дифракционных данных, получаемых с помощью ПЭ микроскопии.	ПК 2.1

ВОПРОСЫ ДЛЯ СОБЕСЕДОВАНИЯ

Вопросы для УО № 1. Работа с современными библиографическими базами данных

1. Основные принципы поиска научной информации в российских и зарубежных реферативных базах данных.
2. Анализ собранной научной и научно-технической информации с помощью инструментов, реализуемых на базе конкретной поисковой или реферативной платформы.
3. Поиск и анализ научной литературы на сайтах издательств научных журналов.

Вопросы для УО № 2. Сбор и обработка экспериментальных данных, полученных с использованием метода хромато-масс-спектрометрии.

1. Получение данных о качественном составе смеси органических соединений на основании анализа хромато-масс-спектров в программном пакете GCMS Solution (Shimadzu corp.);
2. Построение калибровочных зависимостей для обеспечения возможности количественного анализа реакционных смесей органических соединений с использованием хромато-масс-спектров в программном пакете GCMS Solution (Shimadzu corp.);
3. Получение данных о количественном составе смеси органических соединений на основании анализа хромато-масс-спектров в программном пакете GCMS Solution (Shimadzu corp.).

Вопросы для УО №3.

Программное обеспечения для управления библиографической информацией

1. Научные публикации. Типы печатных научных изданий. Первичные и вторичные источники научной информации. Рецензируемые и нерецензируемые источники информации. Научный журнал как архив научных знаний и как инструмент оценки качества результатов научной деятельности. Структура журнала. Типы публикаций в научном журнале (статья, краткое сообщение, письмо в редакцию, обзор). Рецензируемые и нерецензируемые части журнала.
2. Библиографическое описание научной публикации: краткое и полное.
3. Онлайн-адреса статей. Причины непостоянства и неопределенности URL статьи. Динамические адреса онлайн-объектов. Принципы работы CrossRef — агентства, регистрирующего онлайн-научные объекты. Цифровой идентификатор объекта DOI. Структура кода DOI. Использование DOI в онлайн- и печатной литературе в целях однозначного описания местонахождения публикации в Интернете.
4. Возможности программного обеспечения для систематизации библиографических данных и подготовке научных публикаций, отчетов и квалификационных работ

Вопросы для УО № 4. Программное обеспечение для хранения, обработки и визуализации данных химических экспериментов

1. Виды ПО для анализа и визуализации научных данных в химических исследованиях
2. Применение программных продуктов LabPlot, SciDavis, MS Excel, LibreOffice Calc для подготовки графических данных в научные публикации, квалификационные работы.
3. Возможности программного обеспечения для организации электронных лабораторных журналов, возможные проблемы при их использовании.

Вопросы для УО №5. Способы условного отображения химического вещества.

1. Проблемы, возникающие при использовании систематического названия химического вещества в качестве компонента поискового задания.
2. Регистрационные номера химических веществ, используемые в больших базах данных.
3. CAS Registry Number: алгоритм нумерации химических объектов, формат записи.

4. Отображение состава и структуры химического вещества в форме линейной записи (линейной нотации).
5. Линейные нотации SMILES. Причины, обусловившие потребность в подобной форме отображения состава и структуры вещества.
6. Офлайновые и онлайн-средства генерирования кодов SMILES.
7. Достоинства и недостатки SMILES в сфере кодирования химических структур.
8. Международный химический идентификатор InChI. Причины, обусловившие потребность в разработке InChI.
9. Общее представление о формате кода InChI. Офлайновые и онлайн-средства генерирования кодов InChI.
10. Двумерные и трехмерные модели структуры химического вещества. Параметры трехмерной модели: координаты атомов, углы между связями, торсионный (двугранный) угол.
11. Способы и модели визуализации трехмерной структуры

Вопросы для УО №6. Справочные, спектральные и кристаллографические базы данных и работа с ними.

1. Базы данных NIST, RIO-DB, ChemSynthesis, ChemIDplus. Краткая характеристика типа и объема информации, хранящейся в базах данных.
2. Стандарт Международного союза кристаллографии, регламентирующий порядок хранения кристаллографической информации о низкомолекулярных веществах. Онлайн-архивы CIF-файлов. Прикладные программы визуализации и анализа информации, хранящейся в CIF-файлах.

Вопросы для УО №7. Количественный анализ данных ПЭМ и ПЭМ ВР изображений наносистем

1. Расчёт количественных характеристик нанообъектов с использованием программного обеспечения различных компаний.
2. Построение диаграмм распределения частиц наносистем по размерам.

Вопросы для УО №8. Качественный и количественный анализ дифракционных данных, получаемых с помощью ПЭ микроскопии

1. Дифракционные картины, получаемые для наносистем на просвечивающих электронных микроскопах.
2. Качественная идентификация компонентов наносистем по их дифракционным картинам.

ПРИМЕРНЫЙ ПЕРЕЧЕНЬ ВОПРОСОВ И ЗАДАНИЙ К ЗАЧЕТУ

1. Поиск и анализ научной и научно-технической информации в выбранной области химии с помощью российских и зарубежных реферативных баз данных и научных издательств.

2. Систематизации научной литературы и библиографических данных с помощью современного ПО.
3. Обработка экспериментальных данных УФ-спектроскопического анализа с помощью программы «Сканирование».
4. Получение качественных и количественных данных о составе реакционной смеси на основании анализа хромато-масс-спектров в программном пакете GCMS Solution (Shimadzu corp.).
5. Онлайн-адреса статей. Причины непостоянства и неопределенности URL статьи. Динамические адреса онлайн-объектов. Принципы работы CrossRef — агентства, регистрирующего онлайн-научные объекты. Цифровой идентификатор объекта DOI. Структура кода DOI. Использование DOI в онлайн- и печатной литературе в целях однозначного описания местонахождения публикации в Интернете.
6. Системы управления библиографическими базами данных EndNote, Mendeley, Zotero. Библиографические менеджеры как средство создания собственных библиографических БД. Интеграция библиографических менеджеров с онлайн-поисковыми системами и каталогами библиотек.
7. Построение 2D графиков и гистограмм. Редактирование 2D графиков: оси, подписи, работа с цветом, расположение графиков. работа со слоями: расположение графиков; пример аппроксимации данных аналитическими функциями.
8. Способы представления структур химических соединений.
9. Линейные нотации. Регистрационные номера химических веществ, используемые в больших базах данных. CAS Registry Number.
10. Линейные нотации SMILES. Основные правила формулирования кода SMILES и средства его генерирования.
11. Международный химический идентификатор InChI. Понятие об InChIKey.
12. Двумерное описание соединений. Типы структурных формул. Молекулярный редактор. Апплет.
13. Информационно-поисковая система. Базы данных и их типы. Справочные базы данных.
14. Публичные базы данных, содержащие кристаллографическую информацию неорганических соединениях.
15. Стандартные форматы файлов, предназначенных для хранения данных о молекулярной структуре.
16. Расчёт количественных характеристик нанобъектов с использованием программного обеспечения различных компаний.
17. Построение диаграмм распределения частиц наносистем по размерам.
18. Дифракционные картины, получаемые для наносистем на просвечивающих электронных микроскопах.
19. Качественная идентификация компонентов наносистем по их дифракционным картинам.

КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ:

Зачтено:

в целом, сформированные знания предмета, умение применять методы и подходы изучаемой дисциплины при поиске и анализе теоретической и экспериментальной

информации с минимальным количеством ошибок не принципиального характера, наличие навыков применения методов и подходов изучаемой дисциплины при подготовке к выполнению научно-исследовательской работы.

Не зачтено:

фрагментарное знание предмета, отсутствие умений и навыков применения методов и подходов изучаемой дисциплины при подготовке к выполнению научно-исследовательской работы.

Разработчики:



доцент А.А. Курохтина,



доцент М.В. Быков,



проф. Д.С. Суслов,



доцент Н.И. Скрипов

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учетом рекомендаций ПООП по направлению и профилю подготовки 04.04.01 – «Химия».

Программа рассмотрена на заседании кафедры физической и коллоидной химии

«12» мая 2021г.

Протокол № 6

Зав. кафедрой



(А.Ф. Шмидт)

Настоящая программа, не может быть воспроизведена ни в какой форме без предварительного письменного разрешения кафедры-разработчика программы.