

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖАЮ
Проректор по учебной работе
и образовательным инновациям
О.А. Прохоренко

22 декабря 2023 г.
Регистрационный № УД-1108 /б.

ИНФОРМАЦИОННЫЕ БАЗЫ ДАННЫХ ПО ХИМИИ

**Учебная программа учреждения высшего образования
по учебной дисциплине для специальностей:**

- 6-05-0531-01 Химия;**
- 6-05-0531-02 Химия лекарственных соединений;**
- 6-05-0531-04 Химия (научно-педагогическая деятельность);**
- 7-07-0531-01 Фундаментальная химия;**
- 7-07-0531-02 Химия высоких энергий**

2023 г.

Учебная программа составлена на основе образовательных стандартов:

ОСВО 6-05-0531-01-2023 от 10.08.2023 г., ОСВО 6-05-0531-02-2023 от 04.08.2023 г., ОСВО 7-07-0531-02-2023 и 7-07-0531-02-2023 от 10.08.2023 г., ОСВО 6-05-0531-04-2023 от 26.10.2023 г.; а также учебных планов БГУ №№ 6-5.5-41/01, 6-5.5-41/02, 6-5.5-41/03, 6-5.5-42/01, 6-5.5-42/02, 6-5.5-42/03, 6-5.5-43/01, 7-5.5-68/01, 7-5.5-69/01 от 15.05.2023 г.

СОСТАВИТЕЛЬ:

А.В. Кульша, старший преподаватель кафедры общей химии и методики преподавания химии Белорусского государственного университета;

РЕЦЕНЗЕНТЫ:

И.В. Мельситова, доцент кафедры аналитической химии Белорусского государственного университета, кандидат химических наук;

А.Л. Козлова-Козыревская, заведующая кафедрой химии БГПУ им. Максима Танка, кандидат химических наук.

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой общей химии и методики преподавания химии БГУ,
протокол № 5 от 24.11.2023 г.;

Научно-методическим советом БГУ,
протокол № 3 от 30.11.2023 г.

Зав. кафедрой общей химии
и методики преподавания химии



Рабчинский С.М.

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Информационные технологии — 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 Интернете, который становится основным информационным источником научной сферы.

Цели учебной дисциплины:

1. Формирование отношения к Интернету как к рутинному инструменту учебной и научной деятельности.
2. Обучение практическим навыкам и умениям осмысленной работы с наиболее важными онлайн-информационными ресурсами и поисковыми инструментами в области химии.

Задачи учебной дисциплины:

1. Освоение принципов работы поисковых инструментов, правил формулирования текстового запроса, алгоритмов извлечения информации и ее анализа.
2. Ознакомление с текстовыми онлайн-научными ресурсами: журналами, материалами конференций, диссертациями, книгами, полнотекстовыми, реферативными и библиографическими базами данных, патентами, нормативными документами, справочниками.
3. Отработка приемов оценки достоверности документа.
4. Освоение специализированных средств конструирования, визуализации химических структур и прогнозирования физико-химических параметров.
5. Ознакомление со спектральными характеристиками химических объектов и методами идентификации веществ по спектральным данным.

В учебной деятельности используются онлайн- и офлайн-информационные источники и прикладные программы; методическая поддержка обеспечивается использованием специально созданного веб-сайта и Образовательного портала БГУ.

Место учебной дисциплины в системе подготовки специалиста с высшим образованием: дисциплина относится к модулю «Информационные технологии» компонента УВО.

Связи с другими учебными дисциплинами: Дисциплина «Информационные базы данных по химии» базируется на знаниях, полученных студентами ранее в ходе изучения дисциплин «Основы информационных технологий» и «Неорганическая химия», а также востребована в дальнейшем при изучении дисциплин «Органическая химия», «Физико-химические методы анализа».

Требования к компетенциям

В результате изучения учебной дисциплины студент должен закрепить и развить следующие компетенции, предусмотренные образовательными стандартами высшего образования ОСВО 6-05-0531-01-

2023, ОСВО 6-05-0531-02-2023, ОСВО 7-07-0531-02-2023, ОСВО 7-07-0531-02-2023, ОСВО 6-05-0531-04-2023:

Универсальные:

УК-1. Владеть основами исследовательской деятельности, осуществлять поиск, анализ и синтез информации.

УК-2. Решать стандартные задачи профессиональной деятельности на основе применения информационно-коммуникационных технологий.

УК-4. Работать в команде, толерантно воспринимать социальные, этнические, конфессиональные, культурные и иные различия.

УК-5. Быть способным к саморазвитию и совершенствованию в профессиональной деятельности.

Базовые профессиональные:

БПК-4: Осуществлять поиск и анализ данных по изучаемой проблеме в научной литературе, составлять аналитические обзоры, готовить научные статьи, сообщения, рефераты, доклады и материалы к презентациям.

В результате изучения данной дисциплины 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, в патентных базах данных, в справочных базах данных;
- методы локализации искомых научных документов в веб-пространстве;
- 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 ChemOffice;

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.

владеть:

- методикой проведения целенаправленного поиска искомой информации, оперативной коррекции алгоритма работы, анализа достоверности извлекаемых документов.

Структура учебной дисциплины

Дисциплина изучается во 2 семестре 1 курса. Всего на изучение данной дисциплины отводится:

— для очной формы получения высшего образования — 102 часа, в том числе 52 аудиторных часа, из них: 4 часа лекций, 44 часа лабораторных занятий в компьютерном классе, подключенном к сети Интернет (в том числе 16 часов ДО), 4 часа управляемой самостоятельной работы.

Контроль усвоения знаний, навыков и умений осуществляется на всех лабораторных занятиях в форме контрольных работ. Трудоемкость учебной дисциплины составляет 3 зачетных единицы. Форма промежуточной аттестации — зачет.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Тема 1. Терминология Интернета. Текстовая база данных. Синтаксис запроса в текстовой базе данных.

Терминология Интернета: протокол 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. Два режима получения порций информации: перелистывание (Browse) и поиск (Search).

Структура текстовой базы данных: запись, поле, вспомогательные указатели (индексы). Принципиальная схема поиска и извлечения информации. Поисковый процесс как посимвольное сравнение текста задания с текстами, хранящимися в базе данных. Запрос (поисковое задание). Синтаксис запроса. Логические (булевы операторы). Оператор по умолчанию. Операторы расстояния. Использование шаблона для отображения словоформ; для отображения варьируемых фрагментов термина. Режим stemming как способ учета словоформ поисковых терминов. Регистр букв. Стоп-слова. Формулирование запроса на естественном языке. Поле как элемент поискового задания. Поисковые бланки: простейшие и усложненные. Список результатов поиска. Ранжирование списка результатов по степени соответствия поисковому заданию — релевантности.

Тема 2. Универсальные поисковые средства и вспомогательные инструменты. Проблема достоверности онлайн-ресурсов. Онлайн-научный журнал. Сайты издательств.

Принципы работы поисковых средств (поисковой системы, тематического каталога, метапоисковой системы).

Структура поисковой системы (робот, индекс, пользовательская поисковая программа). Автоматизированный способ формирования информационной базы данных поисковой системы. Особенности информационного поиска в индексе поисковой системы: поиск только по терминам, которые присутствуют в документе. Особенности работы поисковых программ, ориентированных на профессионалов; на широкий круг пользователей. Особенности синтаксиса запроса.

Поисковая система Google. Синтаксис запроса, формулируемого на основном поисковом бланке. Правила формулирования запроса на усложненном бланке. Автоматизированный перевод фрагментов текста и веб-страниц с помощью онлайн-средств. Языковые инструменты Google.

Основные характеристики и приемы работы с универсальной поисковой системой Яндекс.

Понятие о видимом и скрытом (глубоком) Интернете. Стратегии извлечения информации в каждом из этих сегментов Интернета.

Википедия как стартовая точка информационного поиска.

Стандартные приемы формальной оценки степени достоверности онлайн-информационного источника. Первоисточник и интерпретация.

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.

Научная статья. Структура статьи (название, авторы, реферат или аннотация, основной текст, ссылки и список использованной литературы, вспомогательные элементы статьи). Препринт, постпринт.

Импакт-факторы научных журналов. Индексы цитирования.

Онлайновые научные журналы. Платные и бесплатные ресурсы. Инициатива Open Access. Приемы визуального определения общедоступности полного текста публикации. Постоянно доступные ресурсы и временно доступные ресурсы. Период эмбарго и движущаяся граница доступности.

Форматы онлайн-публикаций. Организация информационного массива онлайн-журнала как комплекса PDF- и HTML-документов.

Структура сайта издательства и сайта журнала. Структурные элементы Главной страницы издательства, Главной страницы журнала. Работа в режиме Browse. Стандартная цепочка гиперсвязей от Главной страницы сайта издательства к тексту статьи. Структура оглавления выпуска журнала; списка статей, подготовленных к публикации; страницы реферата; статьи в формате PDF; статьи в формате HTML. Приложения к статьям, публикуемые только в электронном формате.

Особенности электронных журналов, не имеющих печатных аналогов.

Общие правила формулирования текстового запроса для поисковой программы издательства. Методика поиска информации по сведениям об авторе публикации. Особенности поиска по фамилии с диакритическими знаками. Транслитерация кириллических фамилий. Методика проведения тематического поиска. Отбор поисковых терминов для запроса. Тематический поиск по полям записей в базе данных.

Портал ScienceDirect — информационный центр издательства Elsevier. Портал SpringerLink — информационный центр издательства Springer. Портал Wiley Online Library — информационный центр издательства Wiley-Blackwell. Сайты издательств научных обществ American Chemical Society и Royal Society of Chemistry.

Тема 3. Библиографическое описание. DOI. Списки журналов. Агрегаторы журналов. Научные публикации в неперидических изданиях.

Библиографическое описание научной публикации: краткое и полное.

Онлайновые адреса статей. Причины непостоянства и неопределенности URL статьи. Принципы работы CrossRef — агентства,

регистрирующего онлайн-объекты. Цифровой идентификатор объекта DOI. Использование DOI в онлайн- и печатной литературе в целях однозначного описания местонахождения публикации в Интернете.

Инструменты обнаружения онлайн-журналов. Методика работы с метасайтами, содержащими списки журналов и их адреса. Онлайн-инструменты, предназначенные для нахождения полного названия журнала по его сокращенному названию. Методика работы с базой данных Genamics JournalSeek.

Методика обнаружения научной публикации по коду DOI; по известному краткому библиографическому описанию.

Общенациональные и региональные агрегаторы журналов (на примере J-STAGE и SCIELO). Тематический агрегатор PubMed Central. Коммерческие агрегаторы (EBSCOhost, IngentaConnect и др.).

Научная электронная библиотека eLibrary. Объем информации в библиотеке; степени ее доступности. Методика информационного поиска в базе данных.

Агрегатор EBSCOhost. Общая характеристика объема, доступности информации, размещенной в базах данных агрегатора. Структура. Синтаксис текстового запроса. Вспомогательные указатели.

Университетские, национальные и международные репозитории научных публикаций.

Материалы конференции. Тезисы докладов, расширенные тезисы, презентации, труды конференции. Типичная структура сайта конференции на разных стадиях подготовки и проведения мероприятия, а также после его окончания.

Диссертация. Автореферат диссертации. Специализированные базы данных с материалами диссертаций. Библиотека авторефератов на сайте ВАК Беларуси. Электронная библиотека авторефератов диссертаций Украины, Электронная библиотека диссертаций Российской государственной библиотеки.

Книга: монография, сборник статей, учебное пособие. Финансовые и юридические проблемы, ограничивающие распространение книжной продукции через Интернет. Копирайт. Электронные библиотеки. Архивы книг по химии и смежным дисциплинам; архивы книг универсальной тематики.

Поисковая система Google Books.

Тема 4. Патентные базы данных.

Патентная литература. Патент, патентная заявка, авторское свидетельство. Патент как юридический документ и как источник научной информации. Структура патентного документа: страница библиографического описания, формула изобретения, описание изобретения.

Национальные, международные и региональные патентные бюро. Общие сведения о процедуре регистрации изобретения.

Основные онлайн-патентные базы данных.

Характеристика объема и типа информации, содержащейся в базах данных информационного центра Европейского патентного бюро Espacenet. Усложненный поисковый бланк: структура, методика формулирования запроса. Синтаксис запроса. Структура списка результатов поиска. Методика коррекции поискового процесса. Структура страницы патента. Получение факсимильной копии патента.

Патентная база данных Национального центра интеллектуальной собственности Республики Беларусь.

Базы данных USPTO. Методика формулирования запроса и коррекции поискового процесса.

Базы данных Роспатента. Краткая характеристика объема и типа информации. Методика информационного поиска.

Патентные базы данных Японии, КНР, стран Юго-Восточной Азии.

Специализированная поисковая система Google Patents. Область применения поисковой системы и сравнение возможностей Google Patents с другими аналогичными инструментами патентного поиска.

Тема 5. Вторичные источники информации.

Принципы использования информационных ресурсов коммерческого агрегатора как общедоступной реферативной или библиографической базы данных.

Реферативный журнал "Химия". Общая характеристика онлайн-базы данных.

Сведения о литературе по радиационной химии, радиохимии, экологии, материаловедению в базе данных INIS.

Специализированная поисковая система Google Scholar. Типы первоисточников, индексируемых поисковой системой. Отличие специализированной поисковой системы Google Scholar от универсальной Google: преимущества и недостатки. Синтаксис запроса. Структура списка результатов поиска. Возможность использования Google Scholar для обнаружения библиографической, реферативной и полнотекстовой информации.

Общее понятие о содержании и структуре ресурсов, хранящихся в базах данных Web of Science и Scopus.

Тема 6. Текстовый и числовой поиск в справочных базах данных. Нормативная литература: стандарты, сертификаты безопасности веществ.

Справочные базы данных, содержащие сведения о физических и химических свойствах химических веществ, смесей, материалов.

Приемы формулирования текстового и числового запросов для целенаправленного поиска справочной информации.

Базы данных NIST Chemistry WebBook и CCCBDB как источник достоверных сведений в области химии. Извлечение информации о веществе методом текстового запроса.

Термодинамические базы данных на сайте химфака МГУ.

Метасайты, содержащие адреса, описания и рекомендации по использованию бесплатных справочных баз данных.

Сертификаты безопасности материала (MSDS). Характеристика достоверности информации, имеющейся в сертификате. Онлайн-базы данных, содержащие MSDS. База данных HSDB. Метасайты.

ГОСТ, ТУ, СанПиН как источники химической информации. Базы данных, содержащие сведения о национальных и межгосударственных стандартах и технологических спецификациях.

Тема 7. Способы отображения информации о химической структуре. Линейные нотации.

Отображение состава и структуры химического вещества в форме линейной записи (линейной нотации).

Линейные нотации SMILES. Основные правила формулирования кода SMILES (кодирование линейных, разветвленных, циклических, ароматических молекулярных структур, ионных соединений, стереоизомеров, схем химических реакций).

Международный химический идентификатор InChI. Причины, обусловившие потребность в разработке InChI. Общее представление о формате кода InChI. Понятие об InChIKey.

Двумерные и трехмерные модели структуры химического вещества. Топология и топография.

Стандартные форматы файлов, предназначенных для хранения данных о молекулярной структуре.

Тема 8. Редактор ChemDraw. Структурный поиск.

ChemDraw: молекулярный редактор, графический редактор. Приемы конструирования и редактирования графических формул и иных химических объектов. Изготовление иллюстративного материала; создание файлов с информацией о структуре вещества; формирование заданий для ведения структурного поиска в базах данных. Генерирование названий веществ, линейных нотаций.

Регистрационные номера химических веществ, используемые в больших базах данных. CAS Registry Number: алгоритм нумерации химических объектов, формат записи. Проблема соотнесения кода и вещества. Онлайн- и офлайн-источники сведений о CAS RN. Использование CAS RN в информационном поиске.

Использование линейных нотаций SMILES в информационном поиске. Средства генерирования кодов SMILES.

Использование линейных нотаций InChI и InChIKey в информационном поиске. Средства генерирования кодов InChI и InChIKey.

Поиск по структуре, по субструктуре. Структурный код, "отпечаток пальцев". Коэффициент Танимото. Принципы использования коэффициента Танимото при информационном поиске по подобию.

Апплеты и плагины, предназначенные для конструирования графических формул; для визуализации трехмерной структуры.

Онлайновые базы данных, в которых реализован поиск по структуре, субструктуре и по подобию структур. Способы формирования структурного запроса и коррекции информационного поиска.

Тема 9. Трехмерная структура. Редактор Chem3D.

Развитие представлений о молекулярной топологии и топографии. Кодировка структуры с помощью матриц и графов. Топологические индексы.

Переход к трехмерной структуре веществ. Использование декартовых и внутренних координат.

Параметры трехмерной структуры вещества: длины связей, валентные и двугранные углы. Способы визуализации трехмерной структуры: проволоочная, стержневая, шаростержневая, объемная (СРК) модели.

Возможности пакетов молекулярной графики (на примере ACDLabs/ChemOffice). Приемы конструирования и редактирования химических объектов, изготовление иллюстративного материала; конвертирование двумерных структур в трехмерные; создание файлов с информацией о структуре вещества; формирование заданий для поиска в базах данных; генерирование названий веществ.

Тема 10. Прогнозирование свойств химического вещества.

Классификация методов моделирования. Современные методы классической и квантовой теории.

Понятие о методе молекулярной механики. Изучение областей поверхности потенциальной энергии стандартными средствами пакетов молекулярной графики.

Использование принципа аддитивности в прогнозировании свойств. Понятие об аддитивных схемах, моделировании QSPR, дескрипторах молекулярной структуры. Принципы построения и статистической верификации аддитивных схем. Их преимущества и недостатки.

Тема 11. Кристаллографические базы данных и визуализация кристаллических структур.

Стандарт Международного союза кристаллографии, регламентирующий порядок хранения кристаллографической информации о низкомолекулярных веществах. Файловый формат CIF. Онлайновые архивы CIF-файлов. Кристаллографическая информация в онлайновых научных журналах.

Прикладные программы визуализации и анализа информации, хранящейся в CIF-файлах. Приемы работы с программой Mercury: визуализация кристаллической структуры вещества; определение структурных параметров.

Тема 12. Каталоги реактивов. Онлайнные базы данных по органическому синтезу.

Каталоги химических реактивов. Методика поиска сведений о реактиве и о фирме-изготовителе. Критерии определения оптимальной цены реактива. Структурный поиск. Метабазы данных о реактивах.

Онлайнные источники информации о методиках органического синтеза. Приемы извлечения и анализа сведений из баз данных ChemSynthesis, ChemSpider SyntheticPages, Organic Syntheses.

Тема 13. Спектральные базы данных: ЯМР, MS, ИК.

Графическое отображение ЯМР-спектров. Апплет как инструмент отображения интерактивного спектра.

Файловый стандарт обмена спектральными данными JCAMP-DX.

Онлайнные репозитории спектральных данных. Информационный поиск в спектральных базах данных и анализ результатов.

ChemSpider как онлайнный центр структурной информации.

Методика извлечения ЯМР-спектров из базы данных SDBS. Идентификация вещества по известному ЯМР-спектру.

Графическое отображение ИК-, масс-спектров.

Онлайнные репозитории спектральных данных. Информационный поиск в спектральных базах данных и анализ результатов.

ИК-, масс-спектры веществ в NIST Chemistry WebBook.

Методика извлечения масс-, ИК-спектров из базы данных SDBS.

Идентификация вещества по известному масс-спектру.

Тема 14. Обобщение по темам 1-13.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Дневная форма получения высшего образования

с применением дистанционных образовательных технологий (ДОТ)

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов			Количество часов УСР	Форма контроля знаний
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия		
1	2	3	4	5	6	7
	Информационные базы данных по химии	4	-	44	4	
1	Терминология Интернета. Текстовая база данных. Синтаксис запроса в текстовой базе данных.	2				
2	Универсальные поисковые средства и вспомогательные инструменты. Проблема достоверности онлайн-ресурсов. Онлайн-научный журнал. Сайты издательств.			4		Устные ответы; письменное оформление контрольных заданий
3	Библиографическое описание. DOI. Списки журналов. Агрегаторы журналов. Научные публикации в неперидических изданиях.			4		Устные ответы
4	Патентные базы данных.			4		Устные ответы
5	Вторичные источники информации.			4		Устные ответы
6	Текстовый и числовой поиск в справочных базах данных. Нормативная литература: стандарты, сертификаты безопасности веществ.			4		Устные ответы; письменное оформление контрольных заданий

7	Способы отображения информации о химической структуре. Линейные нотации.	2				
8	Редактор ChemDraw. Структурный поиск.			4 ДОТ		Устные ответы; письменное оформление контрольных заданий
9	Трехмерная структура. Редактор Chem3D.			4 ДОТ		Устные ответы; письменное оформление контрольных заданий
10	Прогнозирование свойств химического вещества.			4 ДОТ		Устные ответы; письменное оформление контрольных заданий
11	Кристаллографические базы данных и визуализация кристаллических структур.			4 ДОТ		Устные ответы; письменное оформление контрольных заданий
12	Каталоги реактивов. Онлайновые базы данных по органическому синтезу.			4		Устные ответы; письменное оформление контрольных заданий
13	Спектральные базы данных: ЯМР, MS, ИК			4		Устные ответы
14	Обобщение по темам 1-13				4	Контрольная работа

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Рагойша, А. А. Азбука веб-поиска для химиков [Электронный ресурс] – Минск: БГУ, 1999-2023. — <http://www.abc.chemistry.bsu.by>
2. Зибарева, Инна Владимировна. Информационно-поисковая система SciFinder: учебно-методическое пособие / И. В. Зибарева. – Москва ; Берлин : Директ-Медиа, 2020. – 160 с.: ил.
3. Рудакова, Л. В. Информационные технологии в аналитическом контроле биологически активных веществ / Л. В. Рудакова, О. Б. Рудаков. — 4-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2023. — 364 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/312914>
4. Симанков, В. С. Методы и алгоритмы поиска информации в Интернете : монография / В. С. Симанков, Д. М. Толкачев. — Москва : Креативная экономика, 2017. — 332 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/116049>
5. Федоров, В. А. Основы научного поиска : учебное пособие / В. А. Федоров, Н. В. Третьякова. — Екатеринбург : РГППУ, 2022. — 123 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/332822>

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Рагойша, А. А. 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>.
2. Рагойша, А. А. 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>.
3. Рагойша, А. А. Поиск химической информации в Интернете : Поисковые системы и тематические каталоги : учеб. пособие для студ. хим. фак. / А.А.Рагойша. - Мн. : БГУ, 2003. - 87с.
4. Рагойша, А. А. Поиск химической информации в Интернете: научные публикации : учеб. пособие для студентов хим. фак. спец. 1-31 05 01. — Мн.: БГУ, 2007.
5. Chemoinformatics: A Textbook. Edited by Johann Gasteiger and Thomas Engel. – Wiley-VCH, 2003.
6. В. А. Bunin, В. Siesel, G. A. Morales, J. Vajorath. Chemoinformatics: Theory, Practice, & Products. – Springer, 2007.

7. Andrew R. Leach, Valerie J. Gillet. An Introduction to Chemoinformatics. – Springer, 2007.
8. Chemical Information for Chemists: A Primer. Edited by Judith N. Currano and Dana L. Roth. - RSC Publishing, Cambridge, UK, 2014.
9. Потапов, В. М. Химическая информация. Где и как искать химику нужные сведения / В. М. Потапов, Э. К. Кочетова. – М.: Химия, 1988.
10. Устинова, Е. А. Формулы изобретения на химические объекты. – М.: ИНФРА-М, 1997.
11. Соловьев, М.Е. Компьютерная химия / М.Е. Соловьев, М.М. Соловьев. – М.: СОЛОН-Пресс, 2005. – 536 с.
12. Хельтье, Х.-Д. Молекулярное моделирование: теория и практика / Х.-Д. Хельтье, В. Зипль, Д. Роньян, Г. Фолькерс. – М.: Бинوم. Лаборатория знаний, 2010. – 318 с.
13. Руководства пользователя к прикладным программам.

ПЕРЕЧЕНЬ ИСПОЛЬЗУЕМЫХ СРЕДСТВ ДИАГНОСТИКИ И МЕТОДИКА ФОРМИРОВАНИЯ ИТОГОВОЙ ОТМЕТКИ

Для текущего оценки достижений и контроля качества усвоения знаний студентами используется следующий диагностический инструментарий:

- устный опрос;
- письменные контрольные задания;
- письменная контрольная работа.

В качестве формы итогового контроля по учебной дисциплине предусмотрен письменный зачёт.

ПЕРЕЧЕНЬ ЗАДАНИЙ УПРАВЛЯЕМОЙ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

Тема 14. Обобщение по темам 1-13 (4 часа).

Задание 1. Обнаружить и проанализировать научную публикацию по заданному краткому библиографическому описанию; по коду DOI.

Задание 2. Обнаружить патентный документ по заданному номеру патента.

Задание 3. Извлечь нормативный документ, регламентирующий предельно допустимое содержание заданного компонента в питьевой воде.

Задание 4. Обнаружение достоверного значения заданного физико-химического параметра заданного вещества.

Задание 5. Найти сведения о кристаллической структуре заданного вещества и определить его структурные параметры.

Задание 6. Найти научную статью, в которой приводится методика синтеза заданного вещества.

Задание 7. Найти ЯМР-спектр заданного вещества.

Задание 8. Идентифицировать вещество по заданному спектру протонного магнитного резонанса.

(Форма контроля – контрольная работа).

Примерный перечень контрольных заданий

Контрольные задания к теме 2. Универсальные поисковые средства и вспомогательные инструменты. Проблема достоверности онлайн-ресурсов. Онлайн-научный журнал. Сайты издательств.

Задание 1. Методика формулирования текстового запроса для распознавания смысла фрагмента научной публикации с помощью поисковой системы.

Задание 2. Методика использования операторов в текстовом запросе для извлечения списка заданных документов с помощью поисковой системы.

Задание 3. Поиск первоисточника научной информации с помощью поисковой системы.

Задание 4. Оценка достоверности группы веб-документов.

Задание 5. Методика использования онлайн-словарей акронимов.

Задание 6. Перевод веб-страниц с помощью онлайн-средств.

Задание 7. Обнаружение импакт-фактора заданного журнала.

Задание 8. Извлечение списков работ заданного автора и группы авторов, опубликованных в журналах издательств ACS, RSC, Elsevier, Springer, Wiley.

Контрольные задания к теме 3. Библиографическое описание. DOI. Списки журналов. Агрегаторы журналов. Научные публикации в неперидических изданиях.

Задание 1. Обнаружение онлайн-ресурсов заданной группы журналов с использованием вспомогательных баз данных.

Задание 2. По заданному краткому библиографическому описанию обнаружение научной публикации и составление ее полного библиографического описания.

- Задание 3. Извлечение полного текста публикации по известному коду DOI.
- Задание 4. Извлечение заданной информации из баз данных агрегаторов J-STAGE, SCIELO, PubMed Central.
- Задание 5. Проверка адекватности работы поисковой программы агрегатора eLibrary.
- Задание 6. Извлечение информации с использованием указателей в базах данных агрегатора EBSCOhost.
- Задание 7. Поиск научной монографии в базе данных Google Books и анализ достоверности фрагмента опубликованной информации.

Контрольные задания к теме 4. Патентные базы данных.

- Задание 1. Извлечение и анализ патентов заданной тематики из базы данных USPTO.
- Задание 2. Извлечение патентов заданной тематики из базы данных espacenet.
- Задание 3. Методика обнаружения и распознавания текста реферата патентного документа, написанного на незнакомом языке, если в базе данных espacenet присутствует его библиографическое описание, но реферат либо отсутствует, либо имеется только в графическом формате.

Контрольные задания к теме 5. Вторичные источники информации.

- Задание 1. Извлечение списка работ заданного автора в базе данных Web of Science и определение h-индекса автора.
- Задание 2. Извлечение списка работ заданной тематики из базы данных Реферативного журнала Химия.
- Задание 3. Извлечение и анализ полного текста научной работы заданной тематики из базы данных INIS.
- Задание 4. Извлечение полного текста заданной научной статьи с использованием Google Scholar.

Контрольные задания к теме 6. Текстовый и числовой поиск в справочных базах данных. Нормативная литература: стандарты, сертификаты безопасности веществ.

- Задание 1. Определение границ достоверности справочной физико-химической информации, размещенной в базах данных ChemIDplus, ChemSpider, NIST Standard Reference Database.
- Задание 2. Обнаружение достоверного значения заданного физико-химического параметра заданного вещества.
- Задание 3. Обнаружение числовых значений параметров токсичности заданных веществ.
- Задание 4. Обнаружение стандартов Беларуси, регламентирующих допустимое содержание заданного компонента в питьевой воде.
- Задание 5. Обнаружение межгосударственного стандарта, регламентирующего требования к заданному реактиву, и анализ его содержания.
- Задание 6. Обнаружение российского стандарта, регламентирующего требования к заданной пищевой добавке.

Контрольные задания к теме 8. Редактор ChemDraw. Структурный поиск.

Задание 1. Определить CAS RN заданного вещества; провести поиск по коду CAS RN.

Задание 2. Сгенерировать код SMILES для заданной структуры, провести поиск и найти численные значения заданных физико-химических параметров вещества.

Задание 3. Построить графическую модель указанного вещества. Привести его основные идентификаторы. Провести информационный поиск по коду InChI.

Задание 4. Подготовить прототип иллюстративного материала научной публикации.

Задание 5. Провести с помощью апплета JSME структурный поиск в заданной базе данных и определить численные значения заданных параметров веществ.

Задание 6. Провести с помощью апплета JS Draw структурный поиск в каталоге реактивов и определить стоимость заданного реактива.

Контрольные задания к теме 9. Трехмерная структура. Редактор Chem3D.

Задание 1. Используя молекулярный редактор, создать трехмерную модель молекулы заданного вещества. Сгенерировать MOL-файл. Идентифицировать декартовы и внутренние координаты.

Задание 2. Для заданного вещества привести молекулярный граф и соответствующую матрицу расстояний. Подсчитать значение предлагаемого топологического индекса.

Задание 3. Провести оптимизацию геометрии заданной молекулы с использованием метода молекулярной механики. В отчет включить требуемый параметр.

Контрольные задания к теме 10. Прогнозирование свойств химического вещества.

Задание 1. Используя предлагаемую обучающую выборку, составить аддитивную схему для прогнозирования физико-химических свойств веществ.

Задание 2. Провести информационный поиск в NIST Chemistry WebBook. Установить, есть ли корреляция между указанными свойством и топологическим индексом.

Задание 3. Используя предлагаемую обучающую выборку, получить соотношение QSAR для предсказания биологической активности в ряду соединений.

Контрольные задания к теме 11. Кристаллографические базы данных и визуализация кристаллических структур.

Задание 1. Обнаружение заданных веществ в базе данных Inorganic Crystal Structure Database; измерение численных значений структурных параметров кристаллической решетки.

Задание 2. Обнаружение заданных веществ в базе данных Crystallography Open Database; измерение численных значений структурных параметров.

Задание 3. Обнаружение заданного вещества в публикациях журнала Acta Crystallographica; обнаружение численных значений структурных параметров в тексте CIF-файла.

Контрольные задания к теме 12. Каталоги реактивов. Онлайн-базы данных по органическому синтезу.

Задание 1. Обнаружить заданное вещество в печатном каталоге реактивов.

Задание 2. Найти методику синтеза заданного вещества, используя базу данных ChemSynthesis как вспомогательный инструмент.

Задание 3. Найти научные статьи, в которых приведены методики синтеза заданного вещества, используя портал Organic Chemistry Portal как вспомогательный инструмент.

Задание 4. Найти методику синтеза заданного вещества в базе данных Organic Syntheses и составить смету на приобретение исходных реактивов.

Контрольные задания к теме 13. Спектральные базы данных: ЯМР, MS, ИК

Задание 1. Извлечь ЯМР-спектр заданного вещества из базы данных ChemSpider.

Задание 2. Найти значения химических сдвигов для атомов заданного вещества в справочниках сайта Organic Chemistry Info.

Задание 3. Найти в базе данных NMRShiftDB2 и проанализировать ЯМР-спектры заданного вещества.

Задание 4. Найти в базе данных SDBS ЯМР-спектр заданного вещества.

Задание 5. Используя базу данных SDBS, идентифицировать вещество по заданному ЯМР-спектру.

Задание 6. Обнаружить масс-спектр заданного вещества в базе данных NIST Chemistry WebBook и соотнести пики в спектре.

Задание 7. Используя базу данных SDBS, идентифицировать вещество по заданному масс-спектру.

Задание 8. Найти ИК-спектр заданного вещества.

Описание инновационных подходов и методов к преподаванию учебной дисциплины

При организации образовательного процесса используются:

1. **Эвристический подход**, который предполагает:

- осуществление студентами лично-значимых открытий окружающего мира;
- демонстрацию многообразия решений большинства профессиональных задач и жизненных проблем;
- индивидуализацию обучения через возможность самостоятельно ставить цели, осуществлять рефлексию собственной образовательной деятельности.

2. **Методы и приемы развития критического мышления**, которые представляют собой систему, формирующую навыки работы с информацией в процессе чтения и письма; понимания информации как отправного, а не конечного пункта критического мышления.

3. **Практико-ориентированный подход**, который предполагает:

- освоение содержания образования через решения практических задач;
- приобретение навыков эффективного выполнения разных видов профессиональной деятельности;
- использованию процедур, способов оценивания, фиксирующих сформированность профессиональных компетенций.

4. **Метод анализа конкретных ситуаций (кейс-метод)**, который предполагает:

- приобретение студентом знаний и умений для решения практических задач;
- анализ ситуации, используя профессиональные знания, собственный опыт, дополнительную литературу и иные источники.

5. **Метод группового обучения**, который представляет собой форму организации учебно-познавательной деятельности обучающихся, предполагающую функционирование разных типов малых групп, работающих как над общими, так и специфическими учебными заданиями.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы обучающихся

При организации самостоятельной работы студентов по учебной дисциплине «Информационные базы данных по химии» наряду с традиционными источниками информации используются и современные информационные ресурсы. На образовательных порталах educhem.bsu.by и abc.chemistry.bsu.by размещены учебно-программные материалы, учебные материалы для подготовки к лабораторным занятиям, задания для самостоятельной подготовки. При выполнении ряда заданий требуется также осуществлять поиск и критический анализ химической информации на сайтах в сети Интернет.

Контрольные задания по учебной дисциплине составляются с учетом индивидуальной подготовки студентов и могут быть представлены на разном уровне: от заданий, формирующих достаточные знания по изученному учебному материалу на уровне узнавания, к заданиям, формирующим компетенции на уровне воспроизведения, и далее к заданиям, формирующим компетенции на уровне применения полученных знаний. При этом сохраняется требование к освоению необходимого и достаточного объема учебного материала при освоении курса.

Примерный перечень вопросов к зачету

1. Правила формулирования текстового запроса. Операторы, шаблоны. Учет словоформ. Поисковые бланки. Формы сортировки списка результатов поиска.
2. Структура баз данных издательств American Chemical Society, Royal Society of Chemistry, Elsevier, Springer, Wiley-Blackwell. Извлечь список работ заданного автора. Проанализировать структуру одной из статей.
3. Найти научную статью по заданному краткому библиографическому описанию. Сформировать полное библиографическое описание этой статьи в соответствии с ГОСТом.
4. Агрегатор EBSCOhost. Приемы информационного поиска в этой базе данных, в том числе, с использованием указателей.
5. Область использования баз данных INIS, PubMed Central в информационном поиске.
6. Особенности информационного поиска в Google Scholar.
7. Извлечь список патентов заданной тематики (база данных espacenet). Проанализировать структуру одного из патентов.
8. Извлечь Государственный стандарт заданной тематики, действующий на территории Беларуси.
9. Количественные характеристики опасности химического вещества. Обнаружение заданного сертификата безопасности.
10. Инструменты обнаружения достоверных значений термодинамических величин.
11. Регистрационные номера веществ. Принципы использования CAS RN.
12. Линейные нотации. SMILES.
13. Линейные нотации. InChI, InChIKey.
14. Матричная форма отображения молекулярного графа.
15. Файлы обмена структурной информацией. MDL Molfile.
16. Визуальное отображение трехмерной структуры.
17. Молекулярная поверхность.
18. Декартовы и внутренние координаты химических структур.
19. Прогнозирование свойств молекул с использованием принципа аддитивности.
20. Стандартный формат обмена кристаллографической информацией.

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УВО

Название учебной дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы учреждения высшего образования по учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
1. Неорганическая химия	Кафедра неорганической химии	Отсутствуют	Согласовано (протокол № 5 от 24.11.2023 г.)

**ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ ПО
ИЗУЧАЕМОЙ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ**

на ____ / ____ учебный год

№ п/п	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
_____ (протокол № ____ от _____ 20__ г.)

Заведующий кафедрой

УТВЕРЖДАЮ
Декан факультета
