

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНСТВО НАУЧНЫХ ОРГАНИЗАЦИЙ  
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:

**33.06.01 Фармация**

Направленность:

**Фармацевтическая химия. Фармакогнозия**

Квалификация:

**«Исследователь. Преподаватель-исследователь»**

Форма обучения:

**Очная, заочная**

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 33.06.01 Фармация, утвержденного приказом Минобрнауки России от 03.09.2014 № 1201, с учетом приказа Минобрнауки России от 30.04.2015 № 464 «О внесении изменений в федеральные государственные образовательные стандарты высшего образования (уровень кадров высшей квалификации)».

Автор – разработчик:

Ганебных И.Н., к.х.н., руководитель группы хроматомасс спектрометрии, ИОС УрО РАН

## **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 14.04.02 Фармацевтическая химия. Фармакогнозия (направленность Фармацевтическая химия. Фармакогнозия);
- учебному плану ООП по направлению 33.06.01 Фармация.

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 представлена лекционными и лабораторными занятиями.

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 в системе обращения лекарственных средств.

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 эксплуатировании современного оборудования и приборов, при создании новых материалов, при обращении лекарственных средств.

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 - в рамках собеседования по итогам выполнения лабораторных работ;
- промежуточный - зачет (2 семестр);
- итоговый – в рамках государственного экзамена.

## 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), в системе обращения лекарственных средств;

- основ современной методологии решения типовых управленческих и исследовательских задач для различных уровней химико-технологической системы, системы обращения лекарственных средств 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 (УК-4);

- способность и готовность к проведению научных исследований в области обращения лекарственных средств (ОПК-2);

- способность и готовность к научным исследованиям по разработке и созданию инновационных лекарственных средств на основе современных технологий (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 фармацевтической химии, фармакогнозии;

*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 (очная форма обучения)

Виды учебной работы и контроля	Трудоемкость, час/з.е.			
	Всего	По учебным семестрам		
		1	2	5
<b>Аудиторные занятия:</b>	<b>72/2.0</b>	<b>36/1.0</b>	<b>36/1.0</b>	-
Лекции	18/0.5	18/0.5	-	-
Практические занятия	-	-	-	-
Лабораторные занятия	54/1.5	18/0.5	36/1.0	-
<b>Самостоятельная работа студентов:</b>	<b>72/2.0</b>	<b>36/1.0</b>	<b>36/1.0</b>	-
Подготовка к практическим занятиям	-	-	-	-
Подготовка реферата	-	-	-	-
Изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку	72/2.0	36/1.0	36/1.0	-
<b>Вид контроля:</b>	-	-	-	
Текущий	-	-	-	
Промежуточный	-	-	Зачет	-
Итоговый	-	-	-	ГИЭ
<b>Общая трудоемкость по учебному плану</b>	<b>144/4.0</b>	<b>72/2.0</b>	<b>72/2.0</b>	

#### 3.2 Виды учебной работы и контроля освоения дисциплины (заочная форма обучения)

Виды учебной работы и контроля	Трудоемкость, час/з.е.			
	Всего	По учебным семестрам		
		1	2	7
<b>Аудиторные занятия:</b>	<b>8/0.22</b>	<b>4/0.11</b>	<b>4/0.11</b>	-
Лекции	2/0.06	2/0.06	-	-
Практические занятия	-	-	-	-
Лабораторные занятия	6/0.17	2/0.06	4/0.11	-
<b>Самостоятельная работа студентов:</b>	<b>136/3.78</b>	<b>68/1.89</b>	<b>68/1.89</b>	-
Подготовка к практическим занятиям	-	-	-	-

Подготовка реферата	-	-	-	-
Изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку	136/3.78	68/1.89	68/1.89	-
<b>Вид контроля:</b>	-	-	-	
Текущий	-	-	-	
Промежуточный	-	-	Зачет	-
Итоговый	-	-	-	ГИЭ
<b>Общая трудоемкость по учебному плану</b>	<b>144/4.0</b>	<b>72/2.0</b>	<b>72/2.0</b>	

### 3.3 Разделы дисциплины и виды занятий (очная форма обучения)

№ п/п	Название раздела дисциплины	Объем учебной нагрузки, час			
		Всего	Лекции	Лабораторные занятия	Самостоятельная работа
1	Введение	1	1	0	0
2	Презентация и компьютерная манипуляция молекулярных структур	26	4	12	10
3	Молекулярные дескрипторы	26	4	12	10
4	Расчетные методы количественной зависимости структура – активность (свойство) QSAR/QSPR	54	4	18	32
5	Корпоративные информационные системы управления предприятием	19	3	6	10
6	Использование информационных технологий для решения типовых инженерно-экологических и управленческих задач	18	2	6	10
7	<b>Итого(час/з.е.)</b>	<b>144/ 4</b>	<b>18/0.5</b>	<b>54/1.5</b>	<b>72/2.0</b>

### 3.4 Разделы дисциплины и виды занятий (заочная форма обучения)

№ п/п	Название раздела дисциплины	Объем учебной нагрузки, час			
		Всего	Лекции	Лабораторные занятия	Самостоятельная работа
1	Введение. Презентация и компьютерная манипуляция молекулярных структур	27	0,5	1	24.5

2	Молекулярные дескрипторы	26	0.5	1	24.5
3	Расчетные методы количественной зависимости структура – активность (свойство) QSAR/QSPR	54	-	2	52
4	Корпоративные информационные системы управления предприятием	19	0.5	1	17.5
5	Использование информационных технологий для решения типовых инженерно-экологических и управленческих задач	18	0.5	1	16.5
	<b>Итого(час/з.е.)</b>	<b>144/ 4</b>	<b>2/0.06</b>	<b>6/0.18</b>	<b>136/3.76</b>

### 3.5 Содержание разделов дисциплины

#### **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, CytLine, Oracle Application, Ваан, R/3 и др.). Использование Интернет/Интранет 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).

### 3.6 Практические (семинарские) занятия – не предусмотрены

### 3.7 Содержание лабораторных занятий

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

### 3.8 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.

### 3.9 Контрольные работы – не предусмотрены.

### 3.10 Список вопросов для промежуточного тестирования – не предусмотрены.

### 3.11 Тематика рефератов – не предусмотрена.

3.12 Активные методы обучения (деловые игры, научные проекты) - не предусмотрены.

## 4 ОРГАНИЗАЦИЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

**4.1 Текущий контроль** - в рамках собеседования по итогам выполнения лабораторных работ.

**4.2 Промежуточный контроль** - – зачет по итогам собеседования по окончании освоения дисциплины.

**4.3 Итоговый контроль** – в рамках государственного экзамена.

## 5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

При промежуточном 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. J. Gasteiger, T. Engel. Chemoinformatics/ Berlin^ Springer, 2003. 649 p.
2. R. Todeschini, V. Consonni. Molecular Descriptors for Chemoinformatics (2 volumes). Wiley-VCH, 2009
3. Павлов А.Н. Биоинформатика. М.: Гринлайт, 2010. 254 с.

### 6.2 Дополнительная литература

1. A.R. Leach, V.L.Gillet. An Introduction to Chemoinformatics. Berlin: Springer, 2007. 250 p.

### 6.3 Учебно-методические материалы по дисциплине

Нейн Ю.И., Иванцова М.Н., Моржерин Ю.Ю. Компьютерное представление органических молекул. Екатеринбург: УрФУ, 2012.

### 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.taletе.mi.it/dragon\\_net.htm](http://www.taletе.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](http://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.

