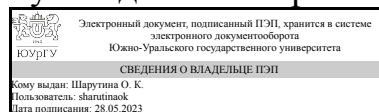


УТВЕРЖДАЮ:  
Руководитель направления



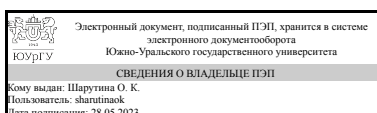
О. К. Шарутина

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

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

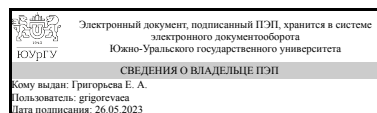
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 13.07.2017 № 655

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



О. К. Шарутина

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



Е. А. Григорьева

## 1. Цели и задачи дисциплины

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

## Краткое содержание дисциплины

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

## 2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

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

## 3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

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

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

Нет

#### 4. Объём и виды учебной работы

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

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

#### 5. Содержание дисциплины

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

##### 5.1. Лекции

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

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

## 5.2. Практические занятия, семинары

Не предусмотрены

## 5.3. Лабораторные работы

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

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

#### 5.4. Самостоятельная работа студента

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

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

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

##### 6.1. Контрольные мероприятия (КМ)

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

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

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

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



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

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

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

## 6.2. Процедура проведения, критерии оценивания

Вид промежуточной аттестации	Процедура проведения	Критерии оценивания
дифференцированный зачет	<p>На зачете происходит оценивание учебной деятельности обучающихся по дисциплине на основе полученных оценок за контрольно-рейтинговые мероприятия текущего контроля. Студент может улучшить свой рейтинг, пройдя контрольное мероприятие промежуточной аттестации - дифференцированный зачет. Зачет проводится во время, указанное в расписании, в виде устного опроса. Студенту задаются 2 вопроса из разных тем курса. Студенту дается 60 минут на подготовку ответов. Затем студент озвучивает свои ответы.</p>	<p>В соответствии с пп. 2.5, 2.6 Положения</p>

### 6.3. Паспорт фонда оценочных средств

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

Типовые контрольные задания по каждому мероприятию находятся в приложениях.

### 7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

#### Печатная учебно-методическая документация

##### а) основная литература:

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

##### б) дополнительная литература:

1. Боровиков, В. П. Программа STATISTICA для студентов и инженеров В. П. Боровиков. - 2-е изд. - М.: Компьютер-пресс, 2001. - 299,[1] с. ил
2. Баскин, И. И. Введение в хемоинформатику [Текст] Ч. 5 Информатика химических реакций в 5 ч. И. И. Баскин, Т. И. Маджидов, А. А. Варнек ; Казан. федер. ун-т. - Казань: Издательство Казанского университета, 2017. - 242 с. ил.

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

##### г) методические указания для студентов по освоению дисциплины:

1. Структура, правила оформления, порядок представления и защиты выпускной квалификационной работы по направлениям подготовки 04.03.01 Химия (уровень бакалавриата) и 04.04.01 Химия (уровень магистратуры) [Электронный ресурс] : метод. указания / Л. А. Сидоренкова, О. К. Шарутина, Е. И. Данилина ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Теорет. и приклад. химия ; ЮУрГУ [http://www.lib.susu.ac.ru/ftd?base=SUSU\\_METHOD&key=000561875](http://www.lib.susu.ac.ru/ftd?base=SUSU_METHOD&key=000561875)
2. Интегрированные пакеты прикладных программ: учеб. пособие по направлению "Приклад. информатика" / В. А. Конов, Е. Н. Горных ; Юж.-Урал.

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

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

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

### Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной форме	Библиографическое описание
1	Основная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Васильев, А. Н. Числовые расчеты в Excel : справочник / А. Н. Васильев. — Санкт-Петербург : Лань, 2021. — 608 с. — ISBN 978-5-8114-1580-9. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/168874">https://e.lanbook.com/book/168874</a> (дата обращения: 08.10.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
2	Дополнительная литература	Учебно-методические материалы кафедры	Григорьева Е.А, Барташевич Е.В. Влияние учета растворителя на качество моделирования основности для азотсодержащих соединений по шкале йода. Наука ЮУрГУ: материалы 68-й научной конференции. Секции естественных наук. ИЦ ЮУрГУ. 2016. С. 127-132. <a href="http://amsmod.susu.ac.ru/wp-content/uploads/2017/02/Nauka_SUSU_2016.pdf">http://amsmod.susu.ac.ru/wp-content/uploads/2017/02/Nauka_SUSU_2016.pdf</a>
3	Дополнительная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Усманов, Р. Р. Статистическая обработка данных агрономических исследований в программе «STATISTICA» : учебно-методическое пособие / Р. Р. Усманов. — Москва : РГАУ-МСХА имени К.А. Тимирязева, 2020. — 177 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/181217">https://e.lanbook.com/book/181217</a> (дата обращения: 11.10.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

Перечень используемого программного обеспечения:

1. Avogadro Chemistry-Avogadro: Molecular Editor and Visualization(бессрочно)
2. BlueSnap-Chemcraft(бессрочно)

Перечень используемых профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

1. -Thr Cambridge Crystallographic Data Centre(бессрочно)

## 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Вид занятий	№ ауд.	Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение, используемое для различных видов занятий
Лабораторные занятия	707 (1)	Программа статистического анализа Statistica, Информационная система ISIDA/QSPR для построения количественных моделей «структура-свойство»