

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"  
Химический институт им. А.М. Бутлерова



УТВЕРЖДАЮ  
Проректор по образовательной деятельности КФУ  
Проф. Д.А. Таюрский

» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

*подписано электронно-цифровой подписью*

## Программа дисциплины

Хемоинформатика

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2016

## Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
  - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
  - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Программу дисциплины разработал(а)(и) старший научный сотрудник, к.н. Маджидов Т.И. (НИЛ Хемоинформатика и молекулярное моделирование, Химический институт им. А.М. Бутлерова), Timur.Madzhidov@kpfu.ru

### 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-1	способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу
ОК-3	готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала
ОПК-1	способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач
ОПК-2	владением современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации
ОПК-4	готовностью к коммуникации в устной и письменной формах на государственном языке Российской Федерации и иностранных языках для решения задач профессиональной деятельности
ПК-2	владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии
ПК-3	использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

- основные понятия, определения, методы и подходы, используемые в хемоинформатике;
- методы хемоинформатики, требующиеся для решения тех или иных задач в химии;
- способы представления химических данных, методы осуществления поиска в химических базах данных; основные химические базы данных, используемые в различных научных целях, и методы работы с ними;
- основные дескрипторы, используемые в хемоинформатике;
- методы теоретического создания и отбора химических соединений для проведения биологического скрининга;
- базовый алгоритм виртуального скрининга химических соединений, основные фильтры, используемые в создании лекарственных препаратов;
- способы построения SAR/QSAR зависимостей и иметь представления об использовании методов интеллектуального анализа данных для этого.

Должен уметь:

- создавать собственные базы данных, оперировать ими, проводить поиск в них;
- использовать дескрипторное представление химического пространства для поиска веществ с требуемыми свойствами, уметь вычислять основные дескрипторы и понимать их смысл;
- подготавливать и курировать данные;
- строить простейшие зависимости SAR/QSAR/QSPR, определять их статистическую значимость;
- использовать методы SAR/QSAR/QSPR в создании веществ с заданными свойствами.

Должен владеть:

- навыками по анализу химических баз данных для решения конкретных задач;
- навыками по решению химических задач с использованием средств хемоинформатики;
- основными программами для создания и оперирования базами данных;
- основными методами интеллектуального анализа и уметь строить SAR/QSAR/QSPR зависимости с их использованием.

Должен демонстрировать способность и готовность:

- использовать средства хемоинформатики для предсказания структуры соединения с требуемыми биологическими, химическими и физико-химическими свойствами.

## 2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ОД.2 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.04.01 "Химия (Хемоинформатика и молекулярное моделирование)" и относится к обязательным дисциплинам.

Осваивается на 2 курсе в 3 семестре.

## 3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных(ые) единиц(ы) на 144 часа(ов).

Контактная работа - 56 часа(ов), в том числе лекции - 26 часа(ов), практические занятия - 30 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 52 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 36 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: экзамен в 3 семестре.

## 4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

### 4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Тема 1. Введение в дисциплину.	3	2	0	0	
2.	Тема 2. Тема 2. Представление химических объектов.	3	6	4	0	6
3.	Тема 3. Тема 3. Химические базы данных.	3	4	6	0	10
4.	Тема 4. Тема 4. Молекулярное разнообразие.	3	4	6	0	6
5.	Тема 5. Тема 5. Молекулярные дескрипторы.	3	4	2	0	10
6.	Тема 6. Тема 6. Моделирование "структура-свойство".	3	6	8	0	8
7.	Тема 7. Тема 7. Защита практической работы	3	0	4	0	12
	Итого		26	30	0	52

### 4.2 Содержание дисциплины (модуля)

#### Тема 1. Тема 1. Введение в дисциплину.

Введение в дисциплину. Основные проблемы химии. Прямая и обратная задачи моделирования. Их решение. Предназначение хемоинформатики. Определение хемоинформатики. Хемоинформатика как научная дисциплина. Хемоинформатика как дисциплина теоретической химии. История хемоинформатики.

#### Тема 2. Тема 2. Представление химических объектов.

Представление молекул. Типичные представления молекул в химии (структурная формула, химическая формула, тривиальное имя). Особенности представления в хемоинформатике, требования к представлениям. Виды представлений. Линейные представления (имена, WLN, SMILES, SLN, InChI). Представление молекулярных графов. Битовые строки (структурные ключи, отпечатки пальцев, хэшированные отпечатки пальцев). Матричное представление, виды матриц. Табличное представление. Трехмерные представления. Координаты атомов. Поверхности. Виды поверхностей (ван-дер-ваальсова поверхность, поверхность Коннолли, доступная растворителю поверхность, поверхность исключенного растворителя, поверхность полости фермента, поверхность изоплотности, раскрашенные поверхности). Молекулярная формы. Структуры Маркуша. Типичные форматы файлов (MDL, Sybyl, PDB). Конвертация между представлениями. Конверсия структура-имя и имя-структура. Конверсия структуры в линейные представления. 2D-3D конвертация.

Представления реакций. Типичное представление реакций. Представление реакции как набора реагентов и продуктов. Представления реакций как характеристик реакционного центра. Представления реакций как разности продуктов и реагентов. Представление реакции Фуджита. Представление Угги-Дугуджи.

Представления химических структур - ручное создание и интерпретация представлений SMILES, InChI. Редактирование структуры молекул с использованием редакторов. Создание файлов, содержащих требуемое представление молекул. Поиск в базе данных по SMARTS.

Редактирование реакций. Поиск атом-атомного соответствия в реакциях. Создание файлов, содержащих различные представления реакций.

### **Тема 3. Тема 3. Химические базы данных.**

Химические базы данных. Типы баз. Базы молекул, спектров, белков, кристаллографические, биомолекулы. Виды поиска в химических базах данных. Поиск по структуре, подструктуре, суперструктуре и по молекулярному сходству в базах данных. Основные алгоритмы поиска. Использование скринов. Рекурсивный подход. Ульмановский подход. Поиск в 3D базах данных. Фармакофоры. Фармакофорный поиск.

Создание и управление компьютерных баз данных химических соединений, реакций и смесей.

### **Тема 4. Тема 4. Молекулярное разнообразие.**

Дизайн библиотек данных. Использование для виртуального скрининга и для высокопроизводительного скрининга. Теоретическая комбинаторная химия. Разбросанные и сфокусированные библиотеки. Генерация структур. RECAP. Fragmenter. Кластеризация молекул. Иерархические подходы. Неиерархические подходы. Отбор молекул без кластеризации.

Навигация в химическом пространстве молекулярных графов и основанные на скаффолдах методы кластеризации объектов в химическом пространстве.

Сравнение библиотек химических соединений, кластеризация объектов и отбор молекул в выборку на основании этого.

Навигация в химическом пространстве с использованием метода GTM.

### **Тема 5. Тема 5. Молекулярные дескрипторы.**

Дескрипторы. Определение и использование дескрипторов. Роль дескрипторов в хемоинформатике. Многообразие дескрипторов. Классификация дескрипторов по функциональности. Физико-химические дескрипторы. Топологические индексы. Трехмерные. Фрагментные дескрипторы. Фармакофорные дескрипторы. Константы заместителей. Квантово-химические дескрипторы. Дескрипторы молекулярных полей. Дескрипторы молекулярного подобию.

Расчет дескрипторов для молекул. Создание входных файлов для анализа связи структуры с реакционной способностью.

### **Тема 6. Тема 6. Моделирование "структура-свойство".**

История моделирования "структура-свойство" SAR/QSAR/QSPR. Классический QSAR (методы Ганча, Фри-Вильсона). SAR/QSAR/QSPR на дескрипторах. Современные подходы. Методы машинного обучения. Интеллектуальный анализ данных в хемоинформатике. Задачи машинного обучения. Методы. MLR, гребневая регрессия, PLS, kNN, искусственные нейронные сети, SVM, решающие деревья, наивный Байес, гауссовы процессы. Использование методов машинного обучения. Валидация и кросс-валидация. ROC кривые. Предобработка данных. Химическая предобработка: отбор данных и стандартизация. Математическая предобработка: стандартизация, шкалирование, нормализация. Случайная корреляция и борьба с ней. Консенсусные подходы. Область применимости. 3D QSAR, основанный на пространственном выравнивании. Методы пространственного выравнивания. CoMFA, CoMSIA, Grid. Методы 3D QSAR, независимые от выравнивания. Grind. Общее понятие об nD QSAR. История моделирования "структура-свойство" SAR/QSAR/QSPR.

Отбор дескрипторов, построение моделей структура-свойство и сравнение качества моделей.

### **Тема 7. Тема 7. Защита практической работы**

Выполнение и защита практической работы. Обсуждение результатов.

## **5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)**

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 5 апреля 2017 года №301)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-996ин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

## **6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)**

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемому результату обучения по дисциплине (модулю);
- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
- критерии оценивания для каждого оценочного средства;
- содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.

Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модулю).

## **7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)**

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы. Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;

- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС 3++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

## **8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)**

Journal of Cheminformatics - <http://jcheminf.springeropen.com/>

Virtual Computational Chemistry Laboratory - <http://www.vcclab.org/>

База данных ChEMBL - <https://www.ebi.ac.uk/chembl>

База данных ChemSpider - <http://www.chemspider.com>

База данных PubChem - <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>

База данных Reaxys - <http://www.reaxys.com>

База данных ZINC - <http://zinc.docking.org>

Программа Fragmenter - <http://infochim.u-strasbg.fr/spip.php?rubrique49>

Программа ISIDA-QSPR - <http://www.vpsolovev.ru/programs/>

Программа Weka (Waikato Environment for Knowledge Analysis) - <http://www.cs.waikato.ac.nz/ml/weka/>

## 9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Методические указания по самостоятельной работе студента:

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины;
- подготовку к практическим занятиям, устным опросам, тестированиям и контрольной работе;
- работу с Интернет-источниками;
- подготовку к сдаче практических работ, защите практической работы, сдаче экзамена.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение настоящей дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе дисциплины 'Хемоинформатика'. По каждой из тем для самостоятельного изучения, приведенных в рабочей программе дисциплины, следует сначала прочитать рекомендованную литературу и при необходимости составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания и являющихся основополагающими в этой теме и для освоения последующих разделов курса.

Перед посещением практического занятия изучите теорию вопроса, предполагаемого к изучению, ознакомьтесь с руководством по соответствующей работе.

Работа с конспектом лекций

Просмотрите конспект сразу после занятий, отметьте материал конспекта лекций, который вызывает затруднения для понимания. Попытайтесь найти ответы на затруднительные вопросы, используя рекомендуемую литературу. Если самостоятельно не удалось разобраться в материале, сформулируйте вопросы и обратитесь за помощью к преподавателю на консультации или ближайшей лекции.

Регулярно отводите время для повторения пройденного материала, проверяя свои знания, умения и навыки по контрольным вопросам.

Методические указания по подготовке к устным опросам:

При самостоятельной работе по подготовке к устному опросу необходимо ознакомиться с темой и списком вопросов по теме. Повторите лекционный материал по теме, отметьте 'проблемные' точки. Определите необходимую литературу из рекомендованной к курсу, можно воспользоваться интернет-источниками. При работе с источниками, учебниками и методическими пособиями, выполняйте общие рекомендации по самостоятельной работе. Сформируйте тезисный список ответов на вопросы, со своими замечаниями и комментариями. Студент должен быть готов ответить на поставленные вопросы, аргументировать свой вариант ответа, ответить на дополнительные и уточняющие вопросы преподавателя. После окончания опроса оценить степень правильности своих ответов, уяснить суть замечаний и комментариев преподавателя.

Методические указания к решению тестов:

Прежде всего, следует внимательно изучить структуру теста, оценить объем времени, выделяемого на данный тест, увидеть, какого типа задания в нем содержатся. Это поможет настроиться на работу.

- Лучше начинать отвечать на те вопросы, в правильности решения которых нет сомнений, пока не останавливаясь на тех, которые могут вызвать долгие раздумья. Это позволит успокоиться и сосредоточиться на выполнении более трудных вопросов.
- Очень важно всегда внимательно читать задания до конца, не пытайтесь понять условия 'по первым словам' или выполнив подобные задания в предыдущих тестированиях. Такая спешка нередко приводит к досадным ошибкам в самых легких вопросах.
- Если вы не знаете ответа на вопрос или не уверены в правильности, следует пропустить его и отметить, чтобы потом к нему вернуться.
- Психологи также советуют думать только о текущем задании. Как правило, задания в тестах не связаны друг с другом непосредственно, поэтому необходимо концентрироваться на данном вопросе и находить решения, подходящие именно к нему. Кроме того, выполнение этой рекомендации даст еще один психологический эффект - позволит забыть о неудаче в ответе на предыдущий вопрос, если таковая имела место.

- Рассчитывать выполнение заданий нужно всегда так, чтобы осталось время на проверку и доработку (примерно 1/3-1/4 запланированного времени). Тогда вероятность опусок сводится к нулю и имеется время, чтобы набрать максимум баллов на легких заданиях и сосредоточиться на решении более трудных, которые вначале пришлось пропустить.
- В составе теста могут встречаться как вопросы с одним правильным вариантом ответа, так и с несколькими.

Методические указания по выполнению контрольной работы:

К выполнению контрольных работ рекомендуется приступать только после усвоения всего необходимого учебного материала дисциплины.

- контрольную работу следует выполнять полностью, т.е. решить все задачи и ответить на все вопросы задания; непонятный вопрос или задачу не следует пропускать; в этом случае необходимо обратиться за помощью к преподавателю;
- ответы в контрольных работах излагать ясно, точно и полно, таким образом, чтобы преподавателю был ясен весь ход рассуждений;
- при выполнении расчётов необходимо внимательно относиться к единицам измерения всех величин, входящих в ту или иную формулу, и проверять, в каких единицах измерения должен быть результат;
- контрольная работа выполняется на листах формата А4;
- не допускаются перечёркивания, вставки, произвольное сокращение слов и каких-либо обозначений, не применяемых в литературе по изучаемой дисциплине;
- неудовлетворительное оформление контрольной работы может быть причиной её незачёта; небрежность письма и грамматические ошибки недопустимы;
- на каждой странице работы необходимо оставлять поля;
- в шапке контрольной работы необходимо написать фамилию, инициалы, группу, направление, курс, наименование дисциплины, номер контрольного задания.

Методические указания по выполнению творческого задания:

Преподавателем дается задание, связанное с подготовкой, химической и математической чисткой данных, построением QSAR моделей, их валидацией, выбором лучшей QSAR модели, скринингом данных из химических баз данных, отбором 'лекарствоподобных соединений'. Отчет о выполнении творческого задания представляется в письменном виде. Он должен содержать цели, задачи, протокол выполнения и описание полученных результатов.

Методические указания по подготовке к экзамену:

При подготовке к экзамену необходимо опираться на лекции и рекомендованную литературу. Вначале следует просмотреть весь материал по сдаваемой дисциплине, отметить для себя трудные вопросы. Обязательно в них разобраться. В заключение еще раз целесообразно повторить основные положения. Каждый экзаменационный билет содержит два вопроса.

#### **10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)**

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

#### **11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)**

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

Компьютерный класс.



## **12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья**

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи:
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 04.04.01 "Химия" и магистерской программе "Хемоинформатика и молекулярное моделирование".

### Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2016

#### Основная литература:

1. Введение в хемоинформатику : учебное пособие / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек .- Казань : [Казанский университет], 2013 . [Ч. 1]: Компьютерное представление химических структур .- 2013 .- 173 с.
2. Введение в хемоинформатику : учебное пособие / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек .- Казань : [Казанский университет], 2013 . Ч. 2: Химические базы данных / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, А. А. Варнек ; Казан. федер. ун-т .- Казань : [Издательство Казанского университета], 2015 .- 185 с.
3. Введение в хемоинформатику : учебное пособие / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек .- Казань : [Казанский университет], 2013 . Ч. 3: Моделирование 'структура-свойство' / И. И. Баскин, Т. И. Маджидов, А. А. Варнек ; Казан. федер. ун-т .- Казань : [Издательство Казанского университета], 2015 .- 302 с.
4. Хемоинформатика и молекулярное моделирование: дистанционный курс для студентов бакалавриата и магистратуры направления подготовки: 020100 'Химия' [Электронный образовательный ресурс]/Химический институт им. А.М. Бутлерова, кафедра органической химии/ Маджидов Т.И. - Казань: Казанский федеральный университет, 2013. -URL: <http://zilant.kpfu.ru/course/view.php?id=376>

#### Дополнительная литература:

1. Каплан И.Г., Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы. [Электронный ресурс] - Электрон. дан. - М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2014. - 397 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/66358>
2. Седых, А.Е. Программа 'XCHEM' - использование фрагментов химической структуры для поиска и моделирования химических и биологических свойств [Электронный ресурс] / А.Е. Седых, И. В. Галкина, В. И. Галкин // Ученые записки Казанского государственного университета. Естественные науки. - 2009. - Т. 151. - N1. - URL: [http://libweb.ksu.ru/e-journals/1815-6169/2009/151\\_1/151\\_1\\_est\\_8.pdf](http://libweb.ksu.ru/e-journals/1815-6169/2009/151_1/151_1_est_8.pdf)
3. Кочелаев, Борис Иванович (д-р физ.-мат. наук ; 1934-) . Квантовая теория : конспект лекций / Б. И. Кочелаев ; Казан. федер. ун-т, Ин-т физики, Каф теорет. физики .- [2-е изд., перераб., доп. и испр.] .- Казань : [Казанский университет], 2013 .- 222 с.
4. Ибрагимов, И.М. Основы компьютерного моделирования наносистем. [Электронный ресурс] / И.М. Ибрагимов, А.Н. Ковшов, Ю.Ф. Назаров. - Электрон. дан. - СПб. : Лань, 2010. - 384 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/156>

**Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем**

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2016

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань" , доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.