

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



*подписано электронно-цифровой подписью*

## Программа дисциплины

Хемоинформатика

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Иновационные материалы и методы их исследования

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2023

## 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): доцент, к.н. (доцент) Маджидов Т.И. (кафедра органической и медицинской химии, 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
ПК-1	Способен использовать полученные знания теоретических основ современной химии и смежных наук при решении профессиональных задач

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 дескрипторов 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 "ФТД.N.02 Факультативные дисциплины" основной профессиональной образовательной программы 04.04.01 "Химия (Инновационные материалы и методы их исследования)" и относится к факультативным 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 2 зачетных(ые) единиц(ы) на 72 часа(ов).

Контактная работа - 20 часа(ов), в том числе лекции - 10 часа(ов), практические занятия - 10 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 52 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 0 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет 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	Се-местр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)						Само-стоя-тельная ра-бота
			Лекции, всего	Лекции в эл. форме	Практи-ческие занятия, всего	Практи-ческие в эл. форме	Лабора-торные работы, всего	Лабора-торные в эл. форме	
1.	Тема 1. Введение в дисциплину.	3	2	0	0	0	0	0	4
2.	Тема 2. Представление химических объектов.	3	0	0	2	0	0	0	10
3.	Тема 3. Химические базы данных.	3	2	0	2	0	0	0	10
4.	Тема 4. Молекулярное разнообразие.	3	2	0	2	0	0	0	10
5.	Тема 5. Молекулярные дескрипторы.	3	2	0	2	0	0	0	10
6.	Тема 6. Моделирование "структура-свойство".	3	2	0	2	0	0	0	8
	Итого		10	0	10	0	0	0	52

##### 4.2 Содержание дисциплины (модуля)

###### Тема 1. Введение в дисциплину.

1. Хемоинформатика как научная дисциплина. Различие и комплементарность хемоинформатики, квантовой химии и методов силовых полей.
2. Хемоинформатика от объектов до главных областей применения. Базовая молекулярная модель. Построение логического вывода.
3. Химическое пространство.
4. Хемоинформатика и хеометрика.
5. Хемоинформатика и биоинформатика.
6. История хемоинформатики.

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

1. Представление молекул.
2. Типичные представления молекул в химии (структурная формула, химическая формула, тривиальное имя).
3. Особенности представления в хемоинформатике, требования к представлениям. Виды представлений.
4. Линейные представления (имена, WLN, SMILES, SLN, InChI).
5. Представление молекулярных графов.
6. Битовые строки (структурные ключи, отпечатки пальцев, хэшированные отпечатки пальцев).
7. Матричное представление, виды матриц.
8. Табличное представление.
9. Трехмерные представления.
10. Координаты атомов.
11. Поверхности.
12. Виды поверхностей (ван-дер-ваальсова поверхность, поверхность Коннолли, доступная растворителю поверхность, поверхность исключенного растворителя, поверхность полости фермента, поверхность изоплотности, раскрашенные поверхности).
13. Молекулярные формы.
14. Структуры Маркуша.

15. Типичные форматы файлов (MDL, Sybyl, PDB).
16. Конвертация между представлениями.
17. Конвертация структура-имя и имя-структура.
18. Конвертация структуры в линейные представления. 2D-3D конвертация.
19. Представления реакций: основные виды.
20. Представления реакции как набора реагентов и продуктов
21. Представления реакции как характеристик реакционного центра
22. Представления реакции как разности продуктов и реагентов

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

1. Структура баз данных.
2. Виды поиска в химических базах данных.
3. Поиск по структуре, подструктуре, суперструктуре и по молекулярному сходству в базах данных различных типов.
4. Основные алгоритмы поиска.
5. Использование скринов.
6. Рекурсивный подход. Ульмановский подход.
7. Поиск в 3D базах данных.
8. Жесткий и гибкий поиск.
9. Основные химические базы данных в хемоинформатике

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

1. Дизайн библиотек данных.
2. Использование для виртуального скрининга и для высокопроизводительного скрининга.
3. Теоретическая комбинаторная химия.
4. Разбросанные и сфокусированные библиотеки.
5. Генерация структур.
6. RECAP.
7. Fragmenter.
8. Кластеризация молекул.
9. Иерархические подходы.
10. Неиерархические подходы.
11. Отбор молекул без кластеризации.

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

1. Определение и использование дескрипторов.
2. Роль дескрипторов в хемоинформатике.
3. Многообразие дескрипторов.
4. Классификация дескрипторов по функциональности.
5. Физико-химические дескрипторы.
6. Топологические индексы.
7. Трехмерные дескрипторы.
8. Фрагментные дескрипторы.
9. Фармакофорные дескрипторы.
10. Константы заместителей.
11. Квантово-химические дескрипторы.
12. Дескрипторы молекулярных полей.

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

1. История моделирования "структура-свойство": SAR/QSAR/QSPR
2. Построение и валидация моделей
3. Предобработка данных
4. Удаление смесей, неорганических и металлоорганических соединений
5. Конвертация структур, удаление солей и выбор состояния ионизации
6. Нормализация специфических хемотипов, резонансных форм и таутометов
7. Выявление дубликатов

8. Заключительная ручная проверка
9. Общие принципы построения моделей
10. Метод наименьших квадратов
11. Понятие об оверфиттинге и принцип оптимальной сложности моделей
12. Принципы отбора дескрипторов
13. Проблемы, связанные с отбором дескрипторов
14. Общие принципы валидации моделей
15. Понятие о внутреннем и внешнем, перекрестном и скользящем контроле
16. Критерии оценки качества регрессионных моделей
17. Критерии оценки качества классификационных моделей
18. Оценка качества моделей для виртуального скрининга: ROC-кривые
19. Принципы оценки и сравнения качества моделей
20. Область применимости моделей
21. Меры, основанные на интервалах значений дескрипторов
22. Меры, основанные на расстояниях в химическом пространстве дескрипторов
23. Меры на основе оценки дисперсии плотности прогноза
24. Меры, основанные на оценке плотностей распределения в химическом пространстве дескрипторов
25. Меры на основе алгоритмов одноклассовой классификации
26. Двухфакторный подход к определению области применимости модели
27. Визуальный анализ эффективности методов определения области применимости моделей
28. Стандартный набор требований к построению и валидации моделей "структура-свойство"
29. Принципы Сетибала (ОЭСР)
30. Рекомендации Унгер-Ганча
31. Рекомендации Тропши по "наилучшей практике" для построения, валидации и применения моделей QSAR
32. Методы машинного обучения
33. Множественная линейная регрессия (MLR)
34. Метод частичных наименьших квадратов (PLS)
35. Метод ближайших соседей (k-NN)
36. Искусственные нейронные сети (ANN)
37. Метод опорных векторов (SVM)
38. Деревья принятия решений
39. Методы 3D-QSAR и nD-QSAR
40. Методы 3D-QSAR, зависящие от выравнивания молекул
41. Стандартный метод CoMFA
42. Топомерный метод CoMFA
43. Метод GRID/GOLPE
44. Метод CoMSIA
45. Методы 3D-QSAR, не требующие предварительного выравнивания молекул
46. Методы 4D-QSAR и nD-QSAR
47. Применение моделирования "структура-свойство"

##### **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 науки и высшего образования Российской Федерации от 6 апреля 2021 года №245)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-99бин/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

ЭОР "Хемоинформатика" - <https://edu.kpfu.ru/enrol/index.php?id=3011>

#### **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 Fragmentor - <http://infochim.u-strasbg.fr/spip.php?rubrique41>

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)**

Вид работ	Методические рекомендации
лекции	В ходе лекционных занятий вести конспектирование учебного материала. Обращать внимание на категории, формулировки, раскрывающие содержание тех или иных явлений и процессов, научные выводы и практические рекомендации, положительный опыт в ораторском искусстве. Желательно оставить в рабочих конспектах поля, на которых делать пометки из рекомендованной литературы, дополняющие материал прослушанной лекции, а также подчеркивающие особую важность тех или иных теоретических положений. Задавать преподавателю уточняющие вопросы с целью уяснения теоретических положений, разрешения спорных ситуаций.
практические занятия	На практических занятиях выполняются лабораторные работы, поэтому на них требуется приходить подготовленными. Повторите лекционный материал по теме предстоящего практического занятия. Обязательно обратите внимание на вызывающий сложности материал. При необходимости, обратитесь за помощью к преподавателю. Темы и материалы для выполнения лабораторных работ размещены в ЭОР "Хемоинформатика" ( <a href="https://edu.kpfu.ru/enrol/index.php?id=3011">https://edu.kpfu.ru/enrol/index.php?id=3011</a> ).
самостоятельная работа	<p>Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины;</li> <li>- подготовку к практическим занятиям, тестированиям и контрольной работе;</li> <li>- работу с Интернет-источниками;</li> <li>- подготовку к сдаче лабораторных (практических) работ, сдаче экзамена.</li> </ul> <p>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.</p> <p>Перед посещением практического занятия изучите теорию вопроса, предполагаемого к изучению, ознакомьтесь с руководством по соответствующей работе.</p> <p>Работа с конспектом лекций</p> <p>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.</p> <p>Регулярно отводите время для повторения пройденного материала, проверяя свои знания, умения и навыки по контрольным вопросам.</p> <p>Обратите внимание, что конспект лекций и слайды презентаций доступны в ЭОР "Хемоинформатика" (<a href="https://edu.kpfu.ru/enrol/index.php?id=3011">https://edu.kpfu.ru/enrol/index.php?id=3011</a>).</p>
зачет	Подготовка к зачету способствует закреплению, углублению и обобщению знаний, получаемых, в процессе обучения, а также применению их к решению практических задач. Готовясь к зачету, студент ликвидирует имеющиеся пробелы в знаниях, углубляет, систематизирует и упорядочивает свои знания. На зачете студент демонстрирует то, что он приобрел в процессе обучения по конкретной учебной дисциплине. При подготовке к зачету необходимо ознакомиться списком вопросов к зачету, повторно ознакомиться с лекционным материалом, систематизировать информацию по курсу. Особое внимание следует уделить разделам курса, изученным самостоятельно и вызывавшим наибольшие затруднения при теоретическом изучении и решении практических задач.

**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 "Инновационные материалы и методы их исследования".

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

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Инновационные материалы и методы их исследования

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2023

#### Основная литература:

1. Зарубина, Т. В. Медицинская информатика : учебник / Зарубина Т. В. [и др. ] - Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2018. - 512 с. - ISBN 978-5-9704-4573-0. - Текст : электронный // ЭБС 'Консультант студента' : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970445730.html> (дата обращения: 19.05.2021). - Режим доступа : по подписке.
2. Хемоинформатика: цифровой образовательный ресурс для студентов [Электронный образовательный ресурс]/Химический институт им. А.М. Бутлерова, кафедра органической химии/ Маджидов Т.И. - Казань: Казанский федеральный университет, 2013. - Режим доступа: URL: <https://edu.kpfu.ru/course/view.php?id=3011> (дата обращения: 19.05.2021). - Режим доступа: только для студентов и сотрудников КФУ.
3. Ибрагимов, И. М. Основы компьютерного моделирования наносистем : учебное пособие / И. М. Ибрагимов, А. Н. Ковшов, Ю. Ф. Назаров. - Санкт-Петербург : Лань, 2021. - 384 с. - ISBN 978-5-8114-1032-3. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/167744> (дата обращения: 19.05.2021). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

#### Дополнительная литература:

1. Каплан, И. Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы : учебное пособие / И. Г. Каплан ; под редакцией Н. Ф. Степанова ; перевод с английского Д. С. Безрукова, И. Г. Рябинкина. - 3-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2017. - 397 с. - ISBN 978-5-00101-503-1. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/94111> (дата обращения: 19.05.2021). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
2. Седых, А.Е. Программа 'ХСНЕМ' - использование фрагментов химической структуры для поиска и моделирования химических и биологических свойств / А.Е. Седых, И. В. Галкина, В. И. Галкин // Ученые записки Казанского государственного университета. Естественные науки. - 2009. - Т. 151. - N1. - Текст : электронный. - URL: [http://libweb.kpfu.ru/e-journals/1815-6169/2009/151\\_1/151\\_1\\_est\\_8.pdf](http://libweb.kpfu.ru/e-journals/1815-6169/2009/151_1/151_1_est_8.pdf) (дата обращения: 19.05.2021). - Режим доступа: открытый.
3. Кочелаев, Б. И. 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.

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

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Инновационные материалы и методы их исследования

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2023

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.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "Консультант студента", доступ к которой предоставлен обучающимся. Многопрофильный образовательный ресурс "Консультант студента" является электронной библиотечной системой (ЭБС), предоставляющей доступ через сеть Интернет к учебной литературе и дополнительным материалам, приобретенным на основании прямых договоров с правообладателями. Полностью соответствует требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования к комплектованию библиотек, в том числе электронных, в части формирования фондов основной и дополнительной литературы.