

МИНОБРНАУКИ РОССИИ



федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования  
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
(технический университет)»  
(СПбГТИ(ТУ))

УТВЕРЖДАЮ

Начальник учебно-методического  
управления

\_\_\_\_\_ В.Э. Щепинин

«\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2013 г.

**ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ПРОФЕССИОНАЛЬНАЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ  
ПРОГРАММА ПОВЫШЕНИЯ КВАЛИФИКАЦИИ  
«ОСНОВЫ ХИМИЧЕСКОЙ ИНФОРМАТИКИ»**

Нормативный срок освоения программы – 72 часа

Факультеты – химической и биотехнологии, информационных технологий и  
управления

Кафедры – химической технологии органических красителей и  
фототропных соединений, системного анализа

Санкт-Петербург

2013

ДПОП повышения квалификации обсуждена на заседании кафедры химической технологии органических красителей и фототропных соединений, протокол № \_\_\_\_\_ от « \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

Зав. кафедрой ХТОК и ФС \_\_\_\_\_ С.М. Рамш

ДПОП повышения квалификации обсуждена на заседании кафедры системного анализа, протокол № \_\_\_\_\_ от « \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

Зав. кафедрой СА \_\_\_\_\_ В.И. Халимон

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химической и биотехнологии, протокол № \_\_\_\_\_ от « \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

Председатель \_\_\_\_\_ М.В. Рутто

Одобрено учебно-методической комиссией факультета информационных технологий и управления, протокол № \_\_\_\_\_ от « \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

Председатель \_\_\_\_\_ В.В. Куркина

Программу составили:

д. х. н., профессор \_\_\_\_\_ С.М. Рамш

к. т. н., доцент \_\_\_\_\_ И.В. Ананченко

СОГЛАСОВАНО:

Директор центра  
дополнительного образования \_\_\_\_\_ А.Н. Крылов

## 1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Дополнительная профессиональная образовательная программа повышения квалификации «Основы химической информатики» (далее - программа) предназначена для повышения квалификации преподавателей высших учебных заведений.

### **Цели программы:**

повысить общую информационную культуру слушателей;

научить слушателей ориентироваться и работать в информационных базах данных и знаний по химии и химической технологии, а также по смежным дисциплинам, в режиме удаленного доступа с использованием специализированных поисковых инструментов (поисковых систем в виде специализированных программных комплексов и приложений).

Изложение и освоение материала проводится с учетом последних достижений информационных технологий.

### **Задачи программы:**

дать слушателям представление о современных системах научно-технической информации по химии и химической технологии, информационных ресурсах крупнейших общественных и университетских научно-технических библиотек (в том числе электронных), рациональном поиске информации по химии и химической технологии с использованием передовых информационных технологий удаленного доступа (с помощью сети Интернет).

обучить слушателей умениям и навыкам поиска химической информации с помощью информационных технологий удаленного доступа (сетевых коммуникационных технологий) – с помощью сети Интернет и локальных сетей. Задачей практических занятий является закрепление дидактического материала на примерах решения конкретных задач по поиску химической информации. На лабораторных занятиях предусматривается практическое использование различных поисковых систем для поиска научно-технической информации по химии и химической технологии, относящейся к сфере научных интересов слушателя.

## 2. ХАРАКТЕРИСТИКА ПОДГОТОВКИ ПО ПРОГРАММЕ

Предшествующий уровень образования – высшее образование.

Нормативный срок освоения программы – 72 часа.

Режим обучения – не более 36 часов в неделю

Форма обучения – с полным отрывом от работы.

УГСН – 240000 «Химическая и биотехнологии».

## 3. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ ПРОГРАММЫ

**В результате освоения программы слушатель должен:**

– **иметь представление:**

о современных источниках и способах получения информации по химии и химической технологии;

– **знать и владеть:**

методами рационального поиска информации по химии и химической технологии с использованием современных ПК и поисковых инструментов (машин), базирующихся на информационных технологиях удаленного доступа к специализированным мировым информационным ресурсам с помощью сети Интернет (сетевых информационных технологиях), а также на новейших библиотечных информационных технологиях с помощью соответствующего программного обеспечения и источников информации на электронных носителях;

– **уметь:**

использовать коммуникационные (удаленного доступа, сетевые) информационные технологии для получения научно-технической информации, необходимой для целей профессиональной деятельности.

#### 4. УЧЕБНО-ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН ПРОГРАММЫ

В таблице 1 представлены модули, разделы, их объемы и виды занятий.

Таблица 1 – Модули, разделы, объемы и виды занятий

№	Наименование разделов, дисциплин и тем	Всего, час.	в том числе			Форма контроля
			лекции	выездные занятия, стажировка, деловые игры и др.	практические / лабораторные занятия	
<b>1</b>	<b>Модуль 1: Источники и системы научно-технической и патентной информации по химии и химической технологии</b>	<b>4</b>	<b>2</b>	<b>-</b>	<b>2</b>	
1	Источники научно-технической и патентной информации по химии и химической технологии	2	2			
2	Системы научно-технической информации по химии и химической технологии	2			2 / 0	
<b>2</b>	<b>Модуль 2: Библиотечные ресурсы научно-технической и патентной информации по химии и химической технологии</b>	<b>12</b>	<b>2</b>	<b>4</b>	<b>2/4</b>	
3	Информационные ресурсы крупнейших публичных и университетских научно-технических библиотек (в том числе электронные) по химии и химической технологии	6		4	2 / 0	
4	Ресурсы фундаментальной библиотеки СПбГТИ (ТУ)	6	2		0 / 4	КР-1
<b>3</b>	<b>Модуль 3: Электронные базы данных по химии и химической технологии</b>	<b>20</b>	<b>20</b>	<b>-</b>	<b>8/2</b>	
5	Справочно-информационные базы данных и знаний по химии и химической технологии, а также по смежным дисциплинам	2			2 / 0	
6	Структура, функции и возможности баз данных Chemical Abstracts Service (CAS): REGISTRY, CAPLUS, CASREACT, CHEMLIST, CHEMCATS и др. Поисковый инструмент (машина) SciFinder	2	2			
7	Информационные online продукты Elsevier B.V. Структура, функции и возможности баз данных Reaxys (Beilstein, Gmelin, поисковый инструмент (машина) CrossFire Commander). Поисковый комплекс SciVerse Hub. Полнотекстовая база данных Science Direct. Библиографическая база данных Scopus. Поисковый инструмент (машина) Scirus	2	2			
8	Структура, функции и возможности сетевой системы баз данных STN International – поисково-аналитического инструмента для науки и образования	2	2			

№	Наименование разделов, дисциплин и тем	Всего, час.	в том числе			Форма контроля
			лекции	выездные занятия, стажировка, деловые игры и др.	практические / лабораторные занятия	
9	Ресурсы и базы данных ВИНТИ по химии и химической технологии	2			2 / 0	
10	Патентные базы данных: Роспатент, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office	4	2		2 / 0	
11	Базы данных MEDLINE (National Library of Medicine, US). База по биологической активности химических соединений PubChem (NSBI, National Library of Medicine, US). Кембриджская база структурных данных Cambridge Structural Database (CSD) как компонент Cambridge Structural Database System (CSD System) (Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC), UK). Коммерческая база eMolecules (eMolecules Inc.)	6	2		2 / 2	
<b>4</b>	<b>Модуль 4: Современные информационные технологии поиска научно-технической информации по химии и химической технологии</b>	<b>34</b>	<b>2</b>	<b>-</b>	<b>14/18</b>	
12	Современные (сетевые) информационные технологии. Методологические основы поиска информации по химии и химической технологии с помощью информационных технологий удаленного доступа (сетевых коммуникационных технологий) – с помощью сети Интернет и локальных сетей	4	2		2 / 0	
13	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных CAS	4			2 / 2	
14	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных Reaxys	6			2 / 4	КР-2
15	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных сетевой системы STN International	10			4 / 6	КР-3
16	Поиск патентной информации (патентный поиск) в базах данных Роспатента, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office. Поиск структурной информации в базах данных CSD	6			2 / 4	КР-4
17	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных ВИНТИ	4			2 / 2	
Итоговый контроль		2				Зачет
<b>Итого</b>		<b>72</b>	<b>16</b>	<b>4</b>	<b>26 / 24</b>	<b>2</b>

## 5. СОДЕРЖАНИЕ ПРОГРАММЫ

### 5.1. Темы и содержание лекций

Количество лекционных часов – 16.

В скобках указано число лекционных часов, предусмотренных для изучения темы.

1. **Тема 1.** *Источники научно-технической и патентной информации по химии и химической технологии (2).*

Современные информационные технологии как совокупность программных и технических средств поиска, сбора, хранения и обработки (систематизации и анализа) информации. Методы, преимущества и недостатки поиска химической информации с использованием традиционных и коммуникационных (сетевых) информационных технологий.

2. **Тема 4.** *Ресурсы фундаментальной библиотеки СПбГТИ (ТУ) (2).*

Возможности Фундаментальной библиотеки СПбГТИ (ТУ) и кафедры системного анализа по предоставлению доступа к информационным сетям и пользованию электронными библиотеками, специализированными базами данных по химии и химической технологии.

3. **Тема 6.** *Структура, функции и возможности баз данных Chemical Abstracts Service (CAS): REGISTRY, CAPLUS, CASREACT, CHEMLIST, CHEMCATS, CAOLD и др. Поисковый инструмент (машина) SciFinder (2).*

Информационная служба Chemical Abstracts Service (CAS). Система регистрации химических соединений в CAS. Информационная система CAS ONLINE.

4. **Тема 7.** *Информационные online продукты Elsevier B.V. Структура, функции и возможности баз данных Reaxys (Beilstein, Gmelin, поисковая машина CrossFire Commander). Поисковый комплекс SciVerse Hub. Полнотекстовая база данных Science Direct. Библиографическая база данных Scopus. Поисковый инструмент (машина) Scirus (2).*

5. **Тема 8.** *Структура и функции сетевой системы баз данных STN International – поисково-аналитический инструмент для науки и образования (2).*

Сеть научно-технической информации STN International. Современные технологии обеспечения доступа к базам данных STN International.

6. **Тема 10.** *Патентные базы данных: Роспатент, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office (2).*

7. **Тема 11.** *Базы данных MEDLINE (National Library of Medicine, US). База по биологической активности химических соединений PubChem (NSBI, National Library of Medicine, US). Кембриджская база структурных данных Cambridge Structural Database (CSD) как компонент Cambridge Structural Database System (CSD System) (Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC), UK). Коммерческая база eMolecules (eMolecules Inc.) (2).*

8. **Тема 12.** *Современные (сетевые) информационные технологии.*

*Методологические основы поиска научно-технической информации по химии и химической технологии с помощью информационных технологий удаленного*

доступа (сетевых коммуникационных технологий) – с помощью сети Интернет и локальных сетей (2).

## 5.2. Тематика выездных занятий

Тематика выездных занятий приведена в таблице 2.

Таблица 2 – Тематика выездных занятий

№ темы	Тематика деловой игры	Объем, час
3	Ознакомление с информационными ресурсами Российской национальной библиотеки (РНБ)	2
3	Ознакомление с информационными ресурсами Библиотеки Российской академии наук (БАН)	2
	<b>Всего</b>	<b>4</b>

## 5.3. Содержание практических занятий

Содержание практических занятий приведено в таблице 3.

Таблица 3 – Содержание практических занятий

№ темы	Содержание практического занятия	Объем, час
2	Системы научно-технической информации по химии и химической технологии	2
3	Информационные ресурсы научно-технических библиотек (в том числе электронные) по химии и химической технологии	2
5	Справочно-информационные базы данных и знаний по химии и химической технологии, а также по смежным дисциплинам	2
9	Ресурсы и базы данных ВИНТИ по химии и химической технологии	2
10	Патентные базы данных: Роспатент, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office	2
11	Базы данных MEDLINE (National Library of Medicine, US). База по биологической активности химических соединений PubChem (NSBI, National Library of Medicine, US). Кембриджская база структурных данных Cambridge Structural Database (CSD) как компонент Cambridge Structural Database System (CSD System) (Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC), UK). Коммерческая база eMolecules (eMolecules Inc.)	2
12	Современные (передовые) информационные технологии. Методологические основы поиска информации по химии и химической технологии с помощью информационных технологий удаленного доступа (сетевых коммуникационных технологий) – с помощью сети Интернет и локальных сетей	2
13	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных CAS	2
14	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных Reaxys	2
15	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных сетевой системы STN International	4
16	Поиск патентной информации (патентный поиск) в базах	2

	данных Роспатента, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office. Поиск структурной информации в базах данных CSD	
17	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных ВИНТИ	2
	<b>Всего</b>	<b>26</b>

#### 5.4. Содержание лабораторных занятий

Содержание лабораторных занятий приведено в таблице 4.

Таблица 4 – Содержание лабораторных занятий

№ темы	Содержание лабораторного занятия	Объем, час
4	Ресурсы фундаментальной библиотеки СПбГТИ (ТУ)	4
11	Базы данных MEDLINE (National Library of Medicine, US). База по биологической активности химических соединений PubChem (NSBI, National Library of Medicine, US). Кембриджская база структурных данных Cambridge Structural Database (CSD) как компонент Cambridge Structural Database System (CSD System) (Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC), UK). Коммерческая база eMolecules (eMolecules Inc.)	2
13	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных CAS	2
14	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных Reaxys	4
15	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных сетевой системы STN International	6
16	Поиск патентной информации (патентный поиск) в базах данных Роспатента, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office. Поиск структурной информации в базах данных CSD	4
17	Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных ВИНТИ	2
	<b>Всего</b>	<b>24</b>

### 6. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Средства оценки усвоения (фонд оценочных средств) программы повышения квалификации «Основы химической информатики» представляют собой комплект контролируемых материалов следующих видов:

- **Контрольные работы** (4 тематические работы, конкретное содержание КР выбирается стажером в соответствии с его профессиональными интересами и согласуется с преподавателем) (см. разд. 6.1). Проверяется знание теоретического материала, практические навыки по информационному поиску с помощью сетевых технологий, полученные на практических и лабораторных занятиях.

Пользуясь источниками информации на электронных носителях и сетевыми информационными технологиями, стажер должен найти и проанализировать доступную

научно-техническую информацию определенного характера по конкретному химическому объекту в соответствии с его профессиональными интересами. Объект и характер искомой информации (поисковый профиль: патентный поиск, методы получения, химические, физико-химические, структурные свойства, потребительские, технико-экономические характеристики и др.) выбираются стажером и согласуются с преподавателем. Каждый стажер получает индивидуальное задание.

Контрольные работы охватывают следующие разделы (темы) программы:

Тема 4. Ресурсы фундаментальной библиотеки СПбГТИ (ТУ) (КР-1).

Тема 14. Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных Reaxys (КР-2).

Тема 15. Поиск информации по химии и химической технологии в учебных базах данных системы STN International (учебный пакет «STN-Mentor») на электронных носителях (КР-3).

Тема 16. Поиск патентной информации (патентный поиск) в базах данных Роспатента, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office. Поиск структурной информации в базах данных CSD (КР-4).

Контрольные работы (результаты поиска информации) оформляются в файловом виде и представляются в совокупности в виде Отчета о стажировке.

• **Контрольные вопросы к зачету.** Представляют перечень вопросов по основному разделу программы «Поиск информации по химии и химической технологии в базах данных сетевой системы STN International» (см. раздел 6.2). Проверяется степень усвоения стажером теоретических и практических знаний, приобретенных им умений и навыков на репродуктивном и продуктивном уровне.

## **6.1. Темы контрольных работ**

### **6.1.1. Контрольная работа № 1**

Ресурсы фундаментальной библиотеки СПбГТИ (ТУ). Поиск информации в электронных ресурсах ФБ с помощью локальной сети.

### **6.1.2. Контрольная работа № 2**

Поиск информации по химии и химической технологии в электронных базах данных Reaxys с помощью сети Интернет в режиме online.

### **6.1.3. Контрольная работа № 3**

Поиск информации по химии и химической технологии в учебных базах данных системы STN International (учебный пакет «STN-Mentor») на электронных носителях.

### **6.1.4. Контрольная работа № 4**

Поиск патентной информации (патентный поиск) в электронных базах данных Роспатента, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office с помощью сети Интернет в режиме online. Поиск структурной информации в базах данных CSD на электронных носителях, а также с помощью сети Интернет в режиме online.

## **6.2. Контрольные вопросы к зачету**

### **6.2.1. Организация баз данных STN International. STN как поисково-аналитический инструмент для решения задач науки и образования:**

Предметная область, литературные источники и их представление. Начальные сведения о STN International. Особенности подключения и работы с базами данных сети STN

International в зависимости от выбранной информационно-поисковой системы: STN Classic, STN on the Web, STN Easy.

### **6.2.2. Основы поиска информации в базах данных сети STN International:**

Изучение языка команд поисковой системы, правил составления запросов, структуры документов баз данных STN, основных типов поисков в базах данных. В ходе практических и лабораторных занятий студентам предоставляется возможность проведения тестовых поисков и отладки поисковых профилей на примере собственных запросов.

Организационно-технологическая структура сети STN International; обзор информационных ресурсов, доступных пользователям сети STN International.

Основные функции и команды информационно-поисковой системы: структура описаний документов в базах данных; команды выбора баз данных (FILE), поиска документов (SEARCH), просмотра словаря базы данных (EXPAND), просмотра документов (DISPLAY), окончания работы (LOGOFF); логические и числовые операторы; операторы маскирования.

Работа с учебными базами данных системы STN International. Отработка навыков поиска в различных базах данных. Поиск патентной информации в учебных базах данных.

### **6.2.3. Базы данных LCA и LREGISTRY:**

Особенности подключения и проведения поисков информации в базах данных сети STN International. Основные типы поисков в библиографических и полнотекстовых базах данных: тематический поиск; поиск публикаций по фамилиям авторов; поиск по названиям организаций; поиск информации о веществах. Вспомогательные функции и команды информационно-поисковой системы MESSENGER (HELP, INDEX, SELECT, SET, SAVE и др.).

Методы поиска информации в базах STN International: выбор баз данных и мультифайловый поиск; кросс-файловый поиск; статистическая обработка результатов поиска. Автоматизированная система заказа полных текстов документов STN. Поиск патентов в сети STN International. Методы повышения эффективности поиска в режиме онлайн.

БД LCA: производитель: Chemical Abstracts Service (CAS), U.S.A. (Информационная служба Американского химического общества (Am. Chem. Soc.), США). Охват: выборка записей за 1969, 1974, 1979, 1984, 1987 и 1988 гг. Объем: более 64 600 записей. Обновление: не обновляется. Тип: библиографическая, учебная. Содержание: химия, биохимия, химические технологии. Язык: английский. Кластер: LEARNING.

БД LREGISTRY – учебная не пополняемая (не обновляемая) база данных. Эта структурная и словарная база данных насчитывает 125 000 соединений, идентифицированных регистрационной системой Chemical Abstracts Service (CAS) и содержащихся в файлах LCA и LCASREACT. Включает уникальный регистрационный номер CAS, название по номенклатуре CA, а также синонимы, молекулярные формулы, таблицы составов сплавов, классы полимеров, нуклеиновые и белковые последовательности и структурные диаграммы. Производитель: Chemical Abstracts Service (CAS), U.S.A. Тип: структурная, обучающая. Тематика: химические вещества. Язык: английский. CAS Reg. No.: да. БД LREGISTRY – учебная база данных для файлов REGISTRY/ZREGISTRY. Всю эту информацию можно искать и просматривать. Левостороннее усечение применимо в полях Chemical Name Segment, Biosequence Index, Notes, Sequence Modification, Substitution.

### **6.2.4. Учебные базы данных LMARPAT и LCASREACT:**

БД MARPAT. Производитель: Chemical Abstracts Service (CAS), U.S.A. Охват: с 1988 г. Объем: более 122 000 записей, более 350 000 структур Маркуша. Обновление: еженедельно. Тип: структурная, библиографическая. Содержание: структуры Маркуша в патентах базы данных CA. Язык: английский. Кластеры: CASLINK, NCASLINK,

STRUCTURE. База данных MARPAT® содержит записи структур Маркуша для патентов, которые имеются в базе данных CA. Типичная структура Маркуша описывает более 250 гипотетических соединений, база данных предлагает более 70 миллионов возможных вариантов для нахождения релевантных патентов. Источники включают патенты 29 национальных патентных ведомств, патенты Европейского патентного ведомства и Всемирной организации интеллектуальной собственности. Возможен поиск по структурам и их просмотр на дисплее. Библиографические данные, рефераты и термины индексирования соответствующих записей CA доступны только для просмотра. Имеется фрагмент базы данных для обучения пользователей – LMARPAT. Поиск информации в учебной БД LMARPAT.

БД LCASREACT. Производитель: Chemical Abstracts Service (CAS), U.S.A. Охват: выборка записей за период 1985-1988 гг. Объем: 471 запись (10 145 одностадийных реакций и 21 477 многостадийных реакций). Обновление: не обновляется. Тип: библиографическая, структурная, учебная. Содержание: химические реакции. Язык: английский. Кластеры: LEARNING. CAS Reg. No.: да. LCASREACT является учебным файлом, предназначенным для обучения пользователей базы данных CASREACT. Файл включает 471 запись с информацией об одностадийных и многостадийных реакциях из журнальных публикаций в разделах по органической химии реферативного издания «Chemical Abstracts» с 1985 по 1988 гг. Поиск информации в учебной БД LCASREACT.

#### **6.2.5. Информация о графических изображениях:**

Графическая информация и ее представление в базах данных химических структур и других химико-технологических базах данных. База данных PATDPA: более 360 000 технических чертежей и структур химических веществ, опубликованных на первых страницах германских патентных документов, начиная с 1983 г. Патентная база данных DWP: более 4 миллионов технических патентных чертежей с 1988 г. База данных EUROPATFULL. Программное обеспечение STN Express и его применение для работы с графической информацией (изображения структурных химических формул и их фрагментов) из баз данных STN.

#### **6.2.6. Стоимость поиска информации в БД STN International, тарифные планы. Стратегия оптимального поиска информации в БД STN International.**

## **7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ПРОГРАММЫ**

### **а) Основные источники**

1. Вениаминова, Г.Н. Информатика: Учебное пособие / Г.Н. Вениаминова, В.Н. Чепикова, А.Г. Ананченко, В.А. Холоднов. – СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2005. – 206 с.
2. Суханов, М.Б. Поиск научной информации в Интернете и безопасная электронная почта: Учебное пособие / М.Б. Суханов, В.А. Холоднов. – СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2004. – 33 с.

### **б) Вспомогательные источники**

1. Потапов, В.М. Поиск химической информации / В.М. Потапов, М.И. Розенман, Э.К. Кочетова, Б.И. Покровский. – М.: Изд-во МГУ, 1990. – 174 с.
2. Потапов, В.М. Химическая информация / В.М. Потапов, Е.К. Кочетова. – Л.: Химия, 1988. – 224 с.
3. Потапов, В.М. Химическая информация: Что, где и как искать химику в литературе / В.М. Потапов, Е.К. Кочетова. – М.: Химия, 1978. – 304 с.
4. Хуторецкий, В.М. Общие представления о поиске научно-технической информации в режиме онлайн. Базы данных STN International в теледоступе: Учебное пособие / В.М. Хуторецкий. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2000. – 43 с.

5. Круковская, Н.В. Поиск информации о химических веществах, сплавах и полимерах с помощью базы данных Registry: Учебное пособие / Н.В. Круковская. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2001. – 36 с.
6. Беляков, А.В. Кембриджская база структурных данных. Практические работы: Методические указания / А.В. Беляков. – СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2004. – 39 с.
7. Cambridge Structural Database System. 2010 Release: Worked Examples / Cambridge: Cambridge Crystallographic Data Centre, 2009. – 49 p.
8. Qingliang, Li. PubChem as a public resource for drug discovery / Qingliang Li [et al.] // Drug Discovery Today – 2010. – Vol. 15, Iss. 23-24. – P. 1052-1057.
9. van Deursen, R. A Searchable Map of PubChem / R. van Deursen, L.C. Blum, J.-L. Reymond // Journal of Chemical Information and Modeling. – 2010. – Vol. 50, Iss. 11. – P. 1924–1934.
10. Кисилева, Н.Н. Компьютерные информационные ресурсы неорганической химии и материаловедения / Н.Н. Кисилева, В.А. Дударев, В.С. Земсков // Усп. химии. – 2010. – Т. 79, № 2. – С. 162-188.
11. Чистякова, Т.Б. Поиск научно-технической информации в глобальной сети Internet: Учебное пособие / Т.Б. Чистякова, О.Г. Бойкова, О.Ф. Блохина. – СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2002. – 76 с.
12. Ананченко, И.В. Поиск научно-технической информации в БД STN International: Электронное пособие / И.В. Ананченко. – СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2006.

## г) Программное обеспечение и Интернет-ресурсы

### *Программное обеспечение:*

1. Стандартные программные продукты «MICROSOFT OFFICE».
2. Компьютерная молекулярная графика: бесплатно распространяемые (no fee, free, trial versions) на соответствующих сайтах (см. ниже) пакеты программ «ACD/Labs» («ACD/ChemSketch»), «MDL/ISIS» / «Сумух» / «Accelrys» («ISIS Draw» и более поздние версии этого продукта – «Сумух Draw», «Accelrys Draw»), «ChemOffice» («ChemDraw») и т. п. – от разработчиков программных продуктов по химии.
3. Специальные программные средства и технологии (программные продукты) важнейших информационно-поисковых систем по химии и химической технологии, доступные в режиме *online* на соответствующих сайтах, указанных ниже: поисковый инструмент БД CAS «SciFinder», поисковый инструмент БД REAXYS «CrossFire Commander», поисковый инструмент поискового комплекса SciVerse Hub «Scirus», поисковые инструменты БД Science Direct, Scopus, STN International, ВИНТИ, Роспатента, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office, MEDLINE (PubChem), Cambridge Structural Database.
4. БД Beilstein, Cambridge Structural Database на электронных носителях (кафедра физики СПбГТИ (ТУ), проф. Беляков А.В.).
5. Учебный пакет «STN-Mentor» системы STN International на электронных носителях (кафедра системного анализа СПбГТИ (ТУ), доц. Ананченко И.В.).
6. ИПС «Web ИРБИС» для поиска библиографической информации на сайте ФБ СПбГТИ (ТУ).
7. Электронно-библиотечные системы (электронные ресурсы), предлагаемые на сайте ФБ СПбГТИ (ТУ).
8. Программа представление структурных данных «Mercury» (бесплатная версия с сайта CCDC (см. ниже)).

Для расширения знаний по программе также рекомендуется использовать *Интернет-ресурсы, приведенные в Приложении 1:*

## 8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ПРОГРАММЫ

Для проведения занятий по программе повышения квалификации «Основы химической информатики» имеется необходимая материально-техническая база: лекционные аудитории, оснащенные мультимедийными проекторами; специализированный компьютерный класс, с подключенными периферийными устройствами и оборудованием, возможностью выхода в Интернет и локальную сеть СПбГТИ(ТУ); компьютерное (*hardware*) и программное (*software*) обеспечение для выполнения практических и лабораторных работ, а также для самостоятельной работы по дисциплине; Фундаментальная библиотека с читальными залами, оснащенными компьютерами, с выходом в Интернет и локальную сеть СПбГТИ(ТУ).

### ПРИЛОЖЕНИЕ 1

(справочное)

#### ИНТЕРНЕТ-РЕСУРСЫ ДЛЯ ХИМИКА-ТЕХНОЛОГА:

##### *Специализированные системы и сайты для поиска научной информации по химии и химической технологии:*

<http://scholar.google.ru/>

<http://www.nature.com>

[www.chemweb.com](http://www.chemweb.com)

<http://www.iupac.org/>

[http://en.wikibooks.org/wiki/Chemical\\_Information\\_Sources](http://en.wikibooks.org/wiki/Chemical_Information_Sources)

<http://www.chem.vsu.ru/content/links.html> (сводка химических сайтов «Химия в сети Интернет»)

<http://www.doaj.org/> (Directory of open access journals)

<http://www.chemport.ru/> (сайт для химиков)

<http://www.chem.isu.ru/leos/index.php> (СИС «Химический ускоритель»)

##### *Базы данных по химии:*

###### **Базы данных Chemical Abstracts Service**

<http://www.cas.org/expertise/cascontent/> (поиск с помощью поисковой машины SciFinder)

###### **Базы данных STN-International**

[http://www.nioch.nsc.ru/sibstn/onlin\\_db.htm](http://www.nioch.nsc.ru/sibstn/onlin_db.htm)

<http://www.nioch.nsc.ru/sibstn/clusters.htm>

<http://www.cas.org/support/stngen/dbss/index.html>

<https://stnweb.cas.org/>

<http://www.stn-international.com/index.php?id=123>

<http://www.stn-international.de/index.php?id=123>

<https://stneasy.cas.org/html/english/login1.html?service=STN>

###### **Базы данных REAXSYS (Beilstein&Gmelin)**

<https://www.reaxys.com/reaxys/secured/start.do> (поиск с помощью поисковой машины Reaxys)

###### **Базы данных поискового комплекса SciVerse Hub**

<http://www.sciencedirect.com/science>

<http://www.scirus.com/srsapp/>

<http://www.scopus.com/home.url>

###### **The Cambridge Structural Database**

<http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd/>

**Базы данных MEDLINE (PubChem databases)**

[http://wwwcf2.nlm.nih.gov.nlm\\_eresources/eresources/search\\_database.cfm](http://wwwcf2.nlm.nih.gov.nlm_eresources/eresources/search_database.cfm)

<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/help.html>

<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/search/search.cgi>

<http://www.hubmed.org/>

<http://www.nioch.nsc.ru/sibstn/databases/medline.htm>

<http://www.disser.ru/library/31/188.htm>

<http://voliadis.ru/pubmed-tips>

**Базы данных ВИНТИ**

<http://www2.viniti.ru/>

**Термические константы веществ**

<http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl?show=welcom.html>

**The Merck Index Online<sup>SM</sup>**

<http://library.dialog.com/bluesheets/html/bl0304.html>

<http://www.emolecules.com/> (Find Suppliers and Information for over 8 Million Unique Chemicals!)

<http://cds.dl.ac.uk/> (the Chemical Database Service)

<http://library.dialog.com/bluesheets/html/bls0016.html#SB0016> (Databases by Subject Category: Science-Chemistry)

<http://www.crct.polymtl.ca/FACT/index.php> (Facility for the Analysis of Chemical Thermodynamics)

[http://www.google.ru/Top/Science/Chemistry/Chemical\\_Databases/](http://www.google.ru/Top/Science/Chemistry/Chemical_Databases/)

[http://www.dmoz.org/Science/Chemistry/Chemical\\_Databases/](http://www.dmoz.org/Science/Chemistry/Chemical_Databases/)

[http://www.dmoz.org/Science/Chemistry/Chemical\\_Databases/](http://www.dmoz.org/Science/Chemistry/Chemical_Databases/)

<http://chem-v.narod.ru/data.htm> (сводка баз данных)

***Патентные базы:*****European Patent Office. Espacenet – Patent search**

<http://www.epo.org/searching/free/espacenet.html>

**The US Patent and Trademark Office**

<http://www.uspto.gov/>

<http://www.google.com/googlebooks/uspto.html>

<http://www.google.com/googlebooks/uspto-patents-pair.html>

<http://www.us-patent-search.com/>

**ФГУ ФИПС**

[http://www1.fips.ru/wps/wcm/connect/content\\_ru/ru/inform\\_resources/inform\\_retrieval\\_system](http://www1.fips.ru/wps/wcm/connect/content_ru/ru/inform_resources/inform_retrieval_system)

**Google Patents**

<http://www.google.com/patents>

***Химические библиотеки:*****Библиотека химического факультета МГУ**

<http://www.chem.msu.ru/rus/library/welcome.html>

**Электронная библиотека учебных материалов по химии МГУ**

<http://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/welcome.html>

**Зарубежные журналы через Интернет МГУ**

<http://www.chem.msu.ru/rus/library/licenced.html>

**Научная электронная библиотека**

<http://elibrary.ru/defaultx.asp>

**Поиск\_электронных\_книг**

<http://www.poiskknig.ru/>

**Научная литература в Интернете**

<http://www.scintific.narod.ru/literature.htm>

**Электронная библиотека по химии и технике**

<http://rushim.ru/books/books.htm>

**Книги по химии и химической технологии**

<http://www.chemport.ru/index.php?cid=29>

***Библиотеки общего профиля:***

**Российская государственная библиотека**

<http://www.rsl.ru>

**Российская национальная библиотека**

<http://www.nlr.ru>

**Государственная публичная научно-техническая библиотека России**

<http://www.gpntb.ru>

**Библиотека по естественным наукам РАН**

<http://www.benran.ru/>

**Библиотека РАН (БАН)**

<http://www.rasl.ru/>

**Фундаментальная библиотека СПбГТИ (ТУ)**

<http://bibl.lti-gti.ru/>

**Библиотека Конгресса США**

<http://www.loc.gov/index.html>

**Британская библиотека**

<http://portico.bl.uk>

***Электронная библиотека диссертаций РФБ:***

<http://www.diss.rsl.ru>

***Издательства научно-технической литературы:***

**Elsevier**

[http://www.elsevier.com/wps/find/homepage.cws\\_home](http://www.elsevier.com/wps/find/homepage.cws_home)

<http://health.elsevier.ru/>

<http://elsevierscience.ru/>

**Wiley-VCH**

<http://www.chemistryviews.org/view/0/index.html>

<http://onlinelibrary.wiley.com/?CRETRY=1&SRETRY=0>

**Springer**

<http://www.springerlink.com/>

<http://www.springerlink.com/home/main.mpx>

***Разработчики программных продуктов по химии, молекулярная графика***

***(Chem-Soft):***

**Advanced Chemistry Development Inc. (ACD/Labs)**

<http://www.acdlabs.com/home/>

**CambridgeSoft Corporation**

<http://www.cambridgesoft.com/>

**Accelrys/Symyx/MDL**

<http://accelrys.com/>

**Reaxys**

<https://www.reaxys.com/info/>

### **World Index of Molecular Visualization Resources**

[www.molvisindex.org](http://www.molvisindex.org)

<http://molvis.sdsc.edu/visres/index.html>

### **Mercury – Crystal Structure Visualisation**

[http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd\\_system/mercury\\_csd/](http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd_system/mercury_csd/)

<http://jmol.sourceforge.net/> (Molecular graphic: Jmol: an open-source Java viewer for chemical structures in 3D)

<http://openrasmol.org/> (Home Page for RasMol and OpenRasMol Molecular Graphics Visualisation Tool)

### ***Вычислительная химия:***

#### **Hypercube, Inc.**

<http://www.computationalchemistry.com/index.htm>

### ***Разработчики программных продуктов по химической технологии (Chem-Engineering):***

#### **Process Systems Enterprise**

<http://www.psenterprise.com/>

#### **Invensys SimSci-Esscor**

<http://iom.invensys.com/EN/Pages/SimSci-Esscor.aspx>

#### **Aspentech**

[http://www.aspentech.com/corporate/press/media\\_kit.aspx](http://www.aspentech.com/corporate/press/media_kit.aspx)

#### **Aspentech HYSYS**

<http://www.aspentech.com/core/aspens-hysys.aspx>

### ***Химические общества, организации, союзы:***

#### **CAS**

<http://info.cas.org/>

#### **RSC**

<http://www.rsc.org/>

<http://www.chemweb.com/>

#### **IUPAC**

<http://old.iupac.org/index.html>

### ***Производители химической и фармацевтической продукции:***

<http://www.chemicalinfo.ru/>

<http://rccnews.ru/Rus/About/>

### ***Электронно-библиотечные системы (электронные ресурсы), предлагаемые библиотекой СПбГТИ(ТУ)***

<http://bibl.lti-gti.ru/main.html>