

Как войти в систему

- Почта НГУ: a.kravchenko4@g.nsu.ru
- Логин: [a.kravchenko4](#)
- Пароль: пароль от вашей почты
- Если у вас нет логина и пароля: ауд. 3214

ВВЕДЕНИЕ В ХЕМОИНФОРМАТИКУ

Автор: Кравченко А.А.

Что такое хемоинформатика?

“Химическая информатика это применение методов информатики для решения химических задач.”

J. Gasteiger and T. Engels (2003). Chemoinformatics: a textbook. Wiley-VCH.

Задачи хемоинформатики:

- создание компьютерных способов организации, хранения и систематизации данных, содержащих информацию о структурах и свойствах химических объектов в базах данных, а также развитию методов поиска и анализа этих данных;
- прогнозирование свойств новых химических объектов и конструирования соединений и материалов с заранее заданными свойствами (на основе связи между структурой молекулы и свойствами вещества).

Содержание курса

- работа с двумерными и трехмерными структурами молекул, визуализация, форматы файлов в химии;
- работа с базами данных (библиографические, структурные, базы данных химических соединений);
- построение графиков, обработка данных (аппроксимация);
- работа в MS Word и PowerPoint, правила оформления рефератов и презентаций.

Содержание курса

1. Практические задания

- 10 заданий по темам занятий. Имеют жесткие сроки сдачи.

2. Тесты по теории

- 2 теста по теоретическому материалу курса (в октябре и декабре). Для получения зачета «автоматом» необходимо набрать более 70% баллов.

3. Устный зачет

- сдается в декабре по теоретическому материалу курса. Выставляется оценка «зачет» или «незачет».

Зачет «автоматом»

Необходимо выполнить следующие условия:

- верно выполнить и вовремя сдать преподавателю все практические задания в семестре;
- набрать суммарно за оба теста по теории не менее 70% баллов.

Получившим зачет «автоматом» устный зачет в декабре сдавать не нужно.

Зачет

Необходимо выполнить следующие условия:

- верно выполнить и сдать преподавателю все практические задания;
- успешно сдать устный зачет в конце декабря.

Зачет не будет выставлен в ведомость, пока не будут выполнены все условия.

Пользователям компьютерных классов НГУ запрещено

- Употребление еды и напитков на рабочих местах в компьютерных классах;
- нахождение верхней одежды рядом с компьютерной техникой;
- перестановка, вскрытие корпуса, а также отключение устройств, кабелей компьютера;
- предоставление общеуниверситетского логина и пароля третьим лицам;
- использование, распространение, хранение и создание программного обеспечения, не предусмотренного рамками данного учебного курса (компьютерные игры, развлекательные программы и т.д.).

Группа ВКонтакте

<https://vk.com/chemoinformaticsnssu>

*Содержит контакты всех преподавателей курса,
а также все материалы для работы в семестре.*