

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: ЧУМАЧЕНКО ТАТЬЯНА АЛЕКСАНДРОВНА
Должность: РЕКТОР
Дата подписания: 30.08.2022 11:12:47
Уникальный программный ключ:
9c9f7aaffa4840d284abe156657b8f85432bdb16



МИНИСТЕРСТВО ПРОСВЕЩЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ГУМАНИТАРНО-ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ЮУГПУ»)

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ
(ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА)

| | |
|---------------|-------------------------------------------------|
| Шифр | Наименование дисциплины (модуля) |
| Б1.В.02.ДВ.01 | Информационные технологии в предметном обучении |

| | |
|-----------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------|
| Код направления подготовки | 44.03.05 |
| Направление подготовки | Педагогическое образование (с двумя профилями подготовки) |
| Наименование (я) ОПОП (направленность / профиль) | Биология. Химия |
| Уровень образования | бакалавр |
| Форма обучения | очная |

Разработчики:

| Должность | Учёная степень, звание | Подпись | ФИО |
|-----------------------|------------------------|---------|------------------------------------|
| Старший преподаватель | | | Меньшиков Владимир Владимирович |

Рабочая программа рассмотрена и одобрена (обновлена) на заседании кафедры (структурного подразделения)

| Кафедра | Заведующий кафедрой | Номер протокола | Дата протокола | Подпись |
|---------------------------------------------------|---------------------------------|-----------------|----------------|---------|
| Кафедра химии, экологии и методики обучения химии | Сутягин Андрей Александрович | 11 | 13.06.2019 | |
| Кафедра химии, экологии и методики обучения химии | Сутягин Андрей Александрович | 1 | 10.09.2020 | |
| | | | | |
| | | | | |

Раздел 1. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения образовательной программы с указанием этапов их формирования

Таблица 1 - Перечень компетенций, с указанием образовательных результатов в процессе освоения дисциплины (в соответствии с РПД)

| Формируемые компетенции | | Планируемые образовательные результаты по дисциплине | | |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------|
| Индикаторы ее достижения | | знатъ | уметь | владеть |
| ПК-3 способен проектировать компоненты образовательных программ, в том числе индивидуальные маршруты обучения, воспитания и развития обучающихся | | | | |
| ПК.3.1 Знает содержание и требования ФГОС, примерной программы по предмету/предметной области, особенности проектирования компонентов образовательной программы | 3.1 базовые понятия курса: информатизация образования, информационно-коммуникационные технологии обучения; программное обеспечение, его классификация, дидактические задачи, решаемые посредством использования ИКТ; | | | |
| ПК.3.2 Умеет проектировать и разрабатывать элементы образовательной программы, рабочую программу по предмету/предметной области; проектировать содержание различных моделей обучения, воспитания и развития | | У.1 применять свои знания в области использования ИКТ на различных этапах уроков и других формах организации учебных занятий; | | |
| ПК.3.3 Владеет способами проектирования образовательных маршрутов разного уровня | | | В.1 приемами и методами формирования положительной мотивации посредством использования ИКТ при изучении отдельных разделов дисциплины; | |
| УК-4 способен осуществлять деловую коммуникацию в устной и письменной формах на государственном языке Российской Федерации и иностранном(ых) языке(ах) | | | | |
| УК 4.1 Знает принципы построения устного и письменного высказывания на русском и иностранном языках; правила и закономерности деловой устной и письменной коммуникации. | 3.2 преимущества использования средств ИКТ в учебном процессе по химии, биологии. | | | |
| УК 4.2 Умеет использовать различные формы, виды устной и письменной коммуникации на русском и иностранном(ых) языке(ах); использовать для коммуникации средства ИКТ; оформлять письменную документацию в электронном виде в соответствии с действующими нормами, правилами и стандартами. | | У.2 использовать разнообразные компьютерные программы при организации проведения различных видов виртуального химического эксперимента; | | |

| | | | |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|--|------------------------------------------------------------------------------------------|
| УК 4.3 Владеет нормами деловой коммуникации на русском и иностранном(ых) языке(ах) в области устной и письменной речи | | | В.2 методами развития творческих способностей с применением ИКТ в работе с обучающимися. |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|--|------------------------------------------------------------------------------------------|

Компетенции связаны с дисциплинами и практиками через матрицу компетенций согласно таблице 2.

Таблица 2 - Компетенции, формируемые в результате обучения

| Код и наименование компетенции | Вес дисциплины в формировании компетенции (100 / количество дисциплин, практик) |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------|
| Составляющая учебного плана (дисциплины, практики, участвующие в формировании компетенции) | |
| ПК-3 способен проектировать компоненты образовательных программ, в том числе индивидуальные маршруты обучения, воспитания и развития обучающихся | |
| Физиолого-гигиеническое обоснование учебно-воспитательного процесса | 5,26 |
| Растения и растительность Челябинской области | 5,26 |
| Химия окружающей среды | 5,26 |
| Аналитическая химия | 5,26 |
| Биотехнология как альтернатива химической технологии | 5,26 |
| Информационные технологии в обучении химии | 5,26 |
| Микробиология | 5,26 |
| Биологические основы сельского хозяйства | 5,26 |
| Практическая биология | 5,26 |
| Адаптация биологических систем к факторам среды | 5,26 |
| Информационные технологии в предметном обучении | 5,26 |
| Внутришкольная образовательная среда как условие здоровьесбережения обучающихся | 5,26 |
| Исследовательская деятельность школьников по химии | 5,26 |
| Проектная деятельность школьников по химии | 5,26 |
| Регуляция функций многоклеточного организма | 5,26 |
| учебная практика (инструментальные методы анализа) | 5,26 |
| учебная практика (комплексная по биологии) | 5,26 |
| учебная практика (междисциплинарная по химии) | 5,26 |
| Этология животных | 5,26 |
| УК-4 способен осуществлять деловую коммуникацию в устной и письменной формах на государственном языке Российской Федерации и иностранном(ых) языке(ах) | |
| Педагогическая риторика | 14,29 |
| Информационные технологии в обучении химии | 14,29 |
| Информационные технологии в предметном обучении | 14,29 |
| Иностранный язык | 14,29 |
| учебная практика (ознакомительная) | 14,29 |
| учебная практика по формированию цифровых компетенций | 14,29 |
| Цифровые технологии в образовании | 14,29 |

Таблица 3 - Этапы формирования компетенций в процессе освоения ОПОП

| Код компетенции | Этап базовой подготовки | Этап расширения и углубления подготовки | Этап профессионально-практической подготовки |
|-----------------|-------------------------|-----------------------------------------|----------------------------------------------|
|-----------------|-------------------------|-----------------------------------------|----------------------------------------------|

| | | | |
|------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| ПК-3 | <p>Физиолого-гигиеническое обоснование учебно-воспитательного процесса, Растения и растительность Челябинской области, Химия окружающей среды, Аналитическая химия, Биотехнология как альтернатива химической технологии, Информационные технологии в обучении химии, Микробиология, Биологические основы сельского хозяйства, Практическая биология, Адаптация биологических систем к факторам среды, Информационные технологии в предметном обучении, Внутришкольная образовательная среда как условие здоровьесбережения обучающихся, Исследовательская деятельность школьников по химии, Проектная деятельность школьников по химии, Регуляция функций многоклеточного организма, учебная практика (инструментальные методы анализа), учебная практика (комплексная по биологии), учебная практика (междисциплинарная по химии), Этология животных</p> | | учебная практика (инструментальные методы анализа), учебная практика (комплексная по биологии), учебная практика (междисциплинарная по химии) |
| УК-4 | <p>Педагогическая риторика, Информационные технологии в обучении химии, Информационные технологии в предметном обучении, Иностранный язык, учебная практика (ознакомительная), учебная практика по формированию цифровых компетенций, Цифровые технологии в образовании</p> | | учебная практика (ознакомительная), учебная практика по формированию цифровых компетенций |

Раздел 2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Таблица 4 - Показатели оценивания компетенций на различных этапах их формирования в процессе освоения учебной дисциплины (в соответствии с РПД)

| № | Раздел | Формируемые компетенции | |
|---|-------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------|
| | | Показатели сформированности (в терминах «знать», «уметь», «владеть») | Виды оценочных средств |
| 1 | Информационные технологии в предметном обучении | | |
| | ПК-3 УК-4 | <p>Знать базовые понятия курса: информатизация образования, информационно-коммуникационные технологии обучения; программное обеспечение, его классификация, дидактические задачи, решаемые посредством использования ИКТ;</p> <p>Знать преимущества использования средств ИКТ в учебном процессе по химии, биологии.</p> | <p>Мультимедийная презентация Опрос Отчет по лабораторной работе</p> |
| | | <p>Уметь применять свои знания в области использования ИКТ на различных этапах уроков и других формах организации учебных занятий;</p> <p>Уметь использовать разнообразные компьютерные программы при организации проведения различных видов виртуального химического эксперимента;</p> | <p>Конспект внеучебного мероприятия Отчет по лабораторной работе</p> |
| | | <p>Владеть приемами и методами формирования положительной мотивации посредством использования ИКТ при изучении отдельных разделов дисциплины;</p> <p>Владеть методами развития творческих способностей с применением ИКТ в работе с обучающимися.</p> | <p>Мультимедийная презентация Опрос Отчет по лабораторной работе</p> |

Таблица 5 - Описание уровней и критериев оценивания компетенций, описание шкал оценивания

| Код | Содержание компетенции | | | |
|-----------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------|---------------------------------|
| Уровни освоения компетенции | Содержательное описание уровня | Основные признаки выделения уровня (критерии оценки сформированности) | Пятибалльная шкала (академическая оценка) | % освоения (рейтинговая оценка) |
| ПК-3 | ПК-3 способен проектировать компоненты образовательных программ, в том числе индивидуальные маршруты обучения, воспитания и развития обучающихся | | | |
| УК-4 | УК-4 способен осуществлять деловую коммуникацию в устной и письменной формах на государственном языке Российской Федерации и иностранном(ых) языке(ах) | | | |

Раздел 3. Типовые контрольные задания и (или) иные материалы, необходимые для оценки планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

1. Оценочные средства для текущего контроля

Раздел: Информационные технологии в предметном обучении

Задания для оценки знаний

1. Мультимедийная презентация:

Тематика мультимедийных презентаций

(подготовка одной презентации (по выбору студента) по каждой теме)

Тема «Работа с компьютером в типовых расчетных программах»

1. Электронные таблицы. Базы данных белковых молекул PDB. Принципы организации электронных таблиц. Обмен данными. Работа с текстовыми данными. Создание собственных баз данных.

2. Пакеты прикладных программ. Пакеты химических прикладных программ. Подпрограммы и пакеты программ для решения комбинаторных задач, применение в химии. ChemOffice10, HyperChem852, Gaussian03, MOPAC, Spartan

Тема «Работа с компьютером в типовых расчетных программах»

1. Оцифровка, программная генерация. Графическое оборудование.

2. Генерация моделей: примитивы, модификация примитивов, криволинейные поверхности.

3. Рендеринг 2D графика и вывод натуральных снимков. 3D модели, объемный рендеринг, анимация.

4. Реалистичный рендеринг. Методы закраски.

5. Визуализация электростатического потенциала молекул.

Тема «Квантово-химические расчеты»

1. Молекулярная механика и квантовая химия. Переносимость параметров молекулярной механики.

2. Молекулярная динамика.

3. Динамика Ланжевена.

4. Методы Монте-Карло.

2. Опрос:

Вопросы для опроса по материалу занятий

Тема «Работа с компьютером в типовых расчетных программах»

1. Электронные таблицы. Принципы организации электронных таблиц. Работа с файлами MS. Структура документов MS Excel.

2. Обмен данными. Динамический обмен данными, связывание и внедрение объектов OLE. Работа с текстовыми данными. Подходы к работе с базами данных. Создание баз данных. Основные понятия, используемые в системах управления.

3. Пакеты прикладных программ. Пакеты химических прикладных программ. Подпрограммы и пакеты программ для решения комбинаторных задач и применение в химии.

Тема «Работа с компьютером в типовых расчетных программах»

1. Оцифровка, программная генерация. Графическое оборудование. Генерация моделей: примитивы, модификация примитивов, криволинейные поверхности.

2. Рендеринг. 2D графика и вывод натуральных снимков.

3. Модели 3D: проволочные, поверхностьные и твердые модели, объемный рендеринг, анимация. Реалистичный рендеринг.

4. Методы закраски: плоская, Гуро, дитеринг. Использование освещения. Типы источников света: рассеянный, направленный, точечный

5. Технология компьютерного исследования химических свойств. Входная информация, перечень рассчитываемых свойств. Типы выходных файлов.

6. Визуализация геометрии, управление расположением, закраска, освещение, способы, изображения молекул, визуализация межатомных сил.

7. Вычисление параметров молекул (расстояния, углы), измерений расстояний и углов в молекулах.

8. Визуализация белковых молекул. Выделение скелета, добавление остатков, использование и выделение шаблонов аминокислот.

9. Изменение параметров молекулярной геометрии с помощью редактора Z-матриц. Формат представления Z-матрицы. Конструирование моделей молекул и их модификация.

10. Способы визуализации – значение потенциала на пробной плоскости, поверхности уровня, линии контуров. Управление размещением контуров, задание базовой плоскости.
11. Различные типы функций для отображения электронной структуры молекул: орбитали, связи, перекрытия.
12. Демонстрация смысла и различия функций: а) влияние выбора базисного набора; б) напряжение в кольце; в) изображение межатомных перекрытий; е) деформации атомной плотности.
13. Визуализация электростатического потенциала молекул в режимах, истинный, мультипольный потенциал. Измерение потенциала в точках.

Тема «Квантово-химические расчеты»

1. Молекулярная механика и квантовая химия
- 2.Модели молекулярной структуры и межмолекулярного взаимодействия. Природа внутри- и межмолекулярного потенциала. Переносимость параметров молекулярной механики
3. Электронная структура и внутримолекулярный потенциал. Форма приближения молекулярной механики. Реализации общего метода молекулярной механики.
4. Универсальные и специализированные потенциалы MM2, MMX, PM3, AMBER и др.
5. Базисные наборы. Выбор базисного набора.
- 6.Методы вычисление градиентов
7. Расчет частот колебаний молекулярной системы в экстремальных точках на ППЭ.
8. Расчет основных энергетических характеристик химической реакции
9. Методы расчета спектральных свойств молекул
- 10 . Спектроскопия. Электронные спектры поглощения. Колебательные спектры. Анимация.
11. Спектроскопия: видимая, УФ, ИК, ЯМР. Масс-спектроскопия. Расчеты с помощью компьютерных программ.
12. Использование динамики Ланжевена и Монте-Карло для проведения компьютерных расчетов.
13. Использования периодических граничных условий в компьютерных расчетах.
14. Моделирования влияния растворителя на свойствах молекул.
15. Проведение смешанного вычисления на одной молекуле. Расчеты белковых молекул.
16. Методы выбора опции для одноточечного вычисления ab initio и оптимизации геометрии
17. Метод исследования энергий корреляции с вычислением MP2
18. Использование Visual Basic для создания баз данных. Встраивание в химические программы. Ознакомление с программой MS Office Access
- 19.Технология построения анимации. Исследование динамики молекул с помощью анимации. Использование анимации для изучения хода реакций и выявление мест предпочтительной координации молекул
20. Исследование поверхности потенциальной энергии молекулярной системы
21. Прогнозирование физико-химических свойств органических соединений на основании их химического строения экспериментально статистическими методами
22. Элементы квантовой механики и теории строения молекул.
23. Системы управления базами данных химической информации
24. Вычисление энергии в одной точке при заданных координатах атомов
25. Незэмпирические и полуэмпирические методы в компьютерных расчетах
26. методы в компьютерных расчетах
- 27.Методы пренебрежения дифференциальным перекрыванием
- 28.Силовые поля молекулярной механики.
- 29.Водородная связь. Расчеты и визуализация.
- 30 Влияние химического строения многоатомных молекул на энергию неналентных взаимодействий
- 31.Исследование методами компьютерного моделирования
32. Конформационный анализ и динамика

3. Отчет по лабораторной работе:

При подготовке к лабораторному занятию и выполнению лабораторной работы рекомендуется:

1. Внимательно изучить материал предстоящей лабораторной работы и составить план ее выполнения.
2. Уделить повышенное внимание экспериментальным особенностям предстоящей работы (используемым реактивам и оборудованию, а также технике работы с ними) и записать эту информацию в лабораторную тетрадь.
3. Выполнять лабораторную работу необходимо аккуратно и в соответствии с планом проведения опыта, отражая все ее основные этапы в лабораторной тетради, и в соответствии с требованиями охраны труда..
4. При подготовке к работе и до ее выполнения студенту необходимо отмечать те вопросы и разделы, которые вызывают у него затруднения, с целью последующей консультации у преподавателя.

5. Лабораторные записи необходимо вести аккуратно, поэтапно, в соответствии с порядком выполнения лабораторной работы. Важно в лабораторную тетрадь заносить тему, цель, материалы и оборудование, необходимые в лабораторной работе; основные этапы проведения опытов и их результаты можно заносить в виде тезисов, либо в табличном или графическом виде, а также с необходимыми рисунками. Проведение необходимых расчетов, аккуратное оформление хода и результатов выполненной работы в лабораторной тетради является необходимым условием оформления отчета по лабораторной работе.
6. Результат лабораторной работы должен быть сохранен на электронном носителе.

Оформление и подготовка отчета по лабораторным работам
"Основы работы в программах по обработке баз данных ".
"Основы рисования (создания) и методы редактирования".
"Создание молекул в 2-Д и 3-Д изображении".
"Измерение свойств молекулярной структуры ".
"Электронные состояния этилена ".
"Смешение вычислительных методов ".
"Оптимизация геометрии молекулярной системы"

Задания для оценки умений

1. Конспект внеучебного мероприятия:

Тематика конспектов внеклассных мероприятий по химии:

1. Компьютерное моделирование на уроках химии.
2. Атом водорода и многоэлектронные атомы : составление игры с помощью компьютерных программ.
3. Метод молекулярных орбиталей : визуализация бинарных молекул второго периода в неорганической химии (8, 9 класс)
4. Схемы расчета эффективных зарядов на атомах : сравнение с таблицей электроотрицательности Поллинга (9 класс)
5. Волновые функции (орбитали) для атома водорода для 2 и 3 периодов периодической системы.

2. Отчет по лабораторной работе:

При подготовке к лабораторному занятию и выполнению лабораторной работы рекомендуется:

1. Внимательно изучить материал предстоящей лабораторной работы и составить план ее выполнения.
2. Уделить повышенное внимание экспериментальным особенностям предстоящей работы (используемым реактивам и оборудованию, а также технике работы с ними) и записать эту информацию в лабораторную тетрадь.
3. Выполнять лабораторную работу необходимо аккуратно и в соответствии с планом проведения опыта, отражая все ее основные этапы в лабораторной тетради, и в соответствии с требованиями охраны труда..
4. При подготовке к работе и до ее выполнения студенту необходимо отмечать те вопросы и разделы, которые вызывают у него затруднения, с целью последующей консультации у преподавателя.
5. Лабораторные записи необходимо вести аккуратно, поэтапно, в соответствии с порядком выполнения лабораторной работы. Важно в лабораторную тетрадь заносить тему, цель, материалы и оборудование, необходимые в лабораторной работе; основные этапы проведения опытов и их результаты можно заносить в виде тезисов, либо в табличном или графическом виде, а также с необходимыми рисунками. Проведение необходимых расчетов, аккуратное оформление хода и результатов выполненной работы в лабораторной тетради является необходимым условием оформления отчета по лабораторной работе.
6. Результат лабораторной работы должен быть сохранен на электронном носителе.

Оформление и подготовка отчета по лабораторным работам
"Основы работы в программах по обработке баз данных ".
"Основы рисования (создания) и методы редактирования".
"Создание молекул в 2-Д и 3-Д изображении".
"Измерение свойств молекулярной структуры ".
"Электронные состояния этилена ".
"Смешение вычислительных методов ".
"Оптимизация геометрии молекулярной системы"

Задания для оценки владений

1. Мультимедийная презентация:

Тематика мультимедийных презентаций

(подготовка одной презентации (по выбору студента) по каждой теме)

Тема «Работа с компьютером в типовых расчетных программах»

1. Электронные таблицы. Базы данных белковых молекул PDB. Принципы организации электронных таблиц. Обмен данными. Работа с текстовыми данными. Создание собственных баз данных.
2. Пакеты прикладных программ. Пакеты химических прикладных программ. Подпрограммы и пакеты программ для решения комбинаторных задач, применение в химии. ChemOffice10, HyperChem852, Gaussian03, MOPAC, Spartan

Тема «Работа с компьютером в типовых расчетных программах»

1. Оцифровка, программная генерация. Графическое оборудование.
2. Генерация моделей: примитивы, модификация примитивов, криволинейные поверхности.
3. Рендеринг 2D графика и вывод натуральных снимков. 3D модели, объемный рендеринг, анимация.
4. Реалистичный рендеринг. Методы закраски.
5. Визуализация электростатического потенциала молекул.

Тема «Квантово-химические расчеты»

1. Молекулярная механика и квантовая химия. Переносимость параметров молекулярной механики.

2. Молекулярная динамика.

3. Динамика Ланжевена.

4. Методы Монте-Карло.

2. Опрос:

Вопросы для опроса по материалу занятий

Тема «Работа с компьютером в типовых расчетных программах»

1. Электронные таблицы. Принципы организации электронных таблиц. Работа с файлами MS. Структура документов MS Excel.
2. Обмен данными. Динамический обмен данными, связывание и внедрение объектов OLE. Работа с текстовыми данными. Подходы к работе с базами данных. Создание баз данных. Основные понятия, используемые в системах управления.
3. Пакеты прикладных программ. Пакеты химических прикладных программ. Подпрограммы и пакеты программ для решения комбинаторных задач и применение в химии.

Тема «Работа с компьютером в типовых расчетных программах»

1. Оцифровка, программная генерация. Графическое оборудование. Генерация моделей: примитивы, модификация примитивов, криволинейные поверхности.
2. Рендеринг. 2D графика и вывод натуральных снимков.
3. Модели 3D: проволочные, поверхностные и твердые модели, объемный рендеринг, анимация. Реалистичный рендеринг.
4. Методы закраски: плоская, Гуро, дитеринг. Использование освещения. Типы источников света: рассеянный, направленный, точечный
5. Технология компьютерного исследования химических свойств. Входная информация, перечень рассчитываемых свойств. Типы выходных файлов.
6. Визуализация геометрии, управление расположением, закраска, освещение, способы, изображения молекул, визуализация межатомных сил.
7. Вычисление параметров молекул (расстояния, углы), измерений расстояний и углов в молекулах.
8. Визуализация белковых молекул. Выделение скелета, добавление остатков, использование и выделение шаблонов аминокислот.
9. Изменение параметров молекулярной геометрии с помощью редактора Z-матриц. Формат представления Z-матрицы. Конструирование моделей молекул и их модификация.
10. Способы визуализации – значение потенциала на пробной плоскости, поверхности уровня, линии контуров. Управление размещением контуров, задание базовой плоскости.
11. Различные типы функций для отображения электронной структуры молекул: орбитали, связи, перекрытия.
12. Демонстрация смысла и различия функций: а) влияние выбора базисного набора; б) напряжение в кольце; в) изображение межатомных перекрытий; е) деформации атомной плотности.
13. Визуализация электростатического потенциала молекул в режимах, истинный, мультипольный потенциал. Измерение потенциала в точках.

Тема «Квантово-химические расчеты»

1. Молекулярная механика и квантовая химия

2. Модели молекулярной структуры и межмолекулярного взаимодействия. Природа внутри- и межмолекулярного потенциала. Переносимость параметров молекулярной механики.
3. Электронная структура и внутримолекулярный потенциал. Форма приближения молекулярной механики. Реализации общего метода молекулярной механики.
4. Универсальные и специализированные потенциалы MM2, MMX, PM3, AMBER и др.
5. Базисные наборы. Выбор базисного набора.
6. Методы вычисление градиентов
7. Расчет частот колебаний молекулярной системы в экстремальных точках на ППЭ.
8. Расчет основных энергетических характеристик химической реакции
9. Методы расчета спектральных свойств молекул
10. Спектроскопия. Электронные спектры поглощения. Колебательные спектры. Анимация.
11. Спектроскопия: видимая, УФ, ИК, ЯМР. Mass-спектроскопия. Расчеты с помощью компьютерных программ.
12. Использование динамики Ланжевена и Монте-Карло для проведения компьютерных расчетов.
13. Использования периодических граничных условий в компьютерных расчетах.
14. Моделирования влияния растворителя на свойствах молекул.
15. Проведение смешанного вычисления на одной молекуле. Расчеты белковых молекул.
16. Методы выбора опции для одноточечного вычисления ab initio и оптимизации геометрии
17. Метод исследования энергий корреляции с вычислением MP2
18. Использование Visual Basic для создания баз данных. Встраивание в химические программы. Ознакомление с программой MS Office Access
19. Технология построения анимации. Исследование динамики молекул с помощью анимации. Использование анимации для изучения хода реакций и выявление мест предпочтительной координации молекул
20. Исследование поверхности потенциальной энергии молекулярной системы
21. Прогнозирование физико-химических свойств органических соединений на основании их химического строения экспериментально статистическими методами
22. Элементы квантовой механики и теории строения молекул.
23. Системы управления базами данных химической информации
24. Вычисление энергии в одной точке при заданных координатах атомов
25. Неэмпирические и полуэмпирические методы в компьютерных расчетах
26. методы в компьютерных расчетах
27. Методы пренебрежения дифференциальным перекрыванием
28. Силовые поля молекулярной механики.
29. Водородная связь. Расчеты и визуализация.
30. Влияние химического строения многоатомных молекул на энергию невалентных взаимодействий
31. Исследование методами компьютерного моделирования
32. Конформационный анализ и динамика

3. Отчет по лабораторной работе:

При подготовке к лабораторному занятию и выполнению лабораторной работы рекомендуется:

1. Внимательно изучить материал предстоящей лабораторной работы и составить план ее выполнения.
2. Уделить повышенное внимание экспериментальным особенностям предстоящей работы (используемым реактивам и оборудованию, а также технике работы с ними) и записать эту информацию в лабораторную тетрадь.
3. Выполнять лабораторную работу необходимо аккуратно и в соответствии с планом проведения опыта, отражая все ее основные этапы в лабораторной тетради, и в соответствии с требованиями охраны труда..
4. При подготовке к работе и до ее выполнения студенту необходимо отмечать те вопросы и разделы, которые вызывают у него затруднения, с целью последующей консультации у преподавателя.
5. Лабораторные записи необходимо вести аккуратно, поэтапно, в соответствии с порядком выполнения лабораторной работы. Важно в лабораторную тетрадь заносить тему, цель, материалы и оборудование, необходимые в лабораторной работе; основные этапы проведения опытов и их результаты можно заносить в виде тезисов, либо в табличном или графическом виде, а также с необходимыми рисунками. Проведение необходимых расчетов, аккуратное оформление хода и результатов выполненной работы в лабораторной тетради является необходимым условием оформления отчета по лабораторной работе.
6. Результат лабораторной работы должен быть сохранен на электронном носителе.

Оформление и подготовка отчета по лабораторным работам

"Основы работы в программах по обработке баз данных".

"Основы рисования (создания) и методы редактирования".

"Создание молекул в 2-Д и 3-Д изображении".

"Измерение свойств молекулярной структуры".

"Электронные состояния этилена".

2. Оценочные средства для промежуточной аттестации

1. Зачет

Вопросы к зачету:

1. Электронные таблицы. Принципы организации электронных таблиц. Работа с файлами MS. Структура документов MS Excel.
2. Пакеты прикладных программ. Пакеты химических прикладных программ. Подпрограммы и пакеты программ для решения комбинаторных задач и применение в химии.
3. Оцифровка, программная генерация. Графическое оборудование. Генерация моделей: примитивы, модификация примитивов, криволинейные поверхности.
4. Модели 3D: проволочные, поверхностные и твердые модели, объемный рендеринг, анимация. Реалистичный рендеринг
5. Технология компьютерного исследования химических свойств. Входная информация, перечень рассчитываемых свойств. Типы выходных файлов.
6. Визуализация геометрии, управление расположением, закраска, освещение, способы, изображения молекул, визуализация межатомных сил.
7. Вычисление параметров молекул (расстояния, углы), измерений расстояний и углов в молекулах.
8. Визуализация белковых молекул. Выделение скелета, добавление остатков, использование и выделение шаблонов аминокислот.
9. Различные типы функций для отображения электронной структуры молекул: орбитали, связи, перекрытия.
10. Молекулярная механика и квантовая химия
11. Универсальные и специализированные потенциалы MM2, MMX, PM3, AMBER и др.
12. Базисные наборы. Выбор базисного набора.
13. Расчет основных энергетических характеристик химической реакции
14. Использования периодических граничных условий в компьютерных расчетах.
15. Моделирования влияния растворителя на свойствах молекул.
16. Проведение смешанного вычисления на одной молекуле. Расчеты белковых молекул.
17. Прогнозирование физико-химических свойств органических соединений на основании их химического строения экспериментально статистическими методами
18. Вычисление энергии в одной точке при заданных координатах атомов
19. Неэмпирические и полуэмпирические методы в компьютерных расчетах
20. Водородная связь. Расчеты и визуализация.
21. Конформационный анализ и динамика
22. Компьютерное моделирование межмолекулярных взаимодействий. Виды невалентных взаимодействий.

Раздел 4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

1. Для текущего контроля используются следующие оценочные средства:

1. Конспект внеучебного мероприятия

Внеучебное (воспитательное) мероприятие целенаправленное взаимодействие преподавателя с обучающимися, учебным коллективом, направленное на решение определенных воспитательных задач.

Выполнение задания по составлению конспекта внеучебного мероприятия

Подготовительная часть:

- определить цели и задачи мероприятия;
- выбрать виды, формы и методы работы с учетом содержания и направленности воспитательных задач, возраста обучающихся (педагогическая практика), традиций, технических возможностей;
- продумать, как максимально занять обучающихся в подготовке и проведении мероприятия;
- определить возможность участия специалистов по профилю, тематике мероприятия, представителей организаций самоуправления, учреждения образования;
- выбрать литературу, необходимую для разработки внеучебного мероприятия, с указанием выходных данных.

Примерная схема конспекта внеучебного мероприятия

1. Тема мероприятия.

2. Цели.

3. Формы, методы и приемы организации индивидуальной и групповой деятельности обучающихся с учетом особенностей класса, в котором будет проведено мероприятие.

4. Дидактические средства, используемые в ходе проведения мероприятия.

5. Ход мероприятия (подробное описание деятельности студента как руководителя и деятельности обучающихся)

6. Подведение итогов (выводы, обобщения, сделанные детьми или самим студентом для понимания степени достижения цели мероприятия).

Схема конспекта внеучебного мероприятия может быть дополнена другими элементами.

2. Мультимедийная презентация

Мультимедийная презентация – способ представления информации на заданную тему с помощью компьютерных программ, сочетающий в себе динамику, звук и изображение.

Для создания компьютерных презентаций используются специальные программы: PowerPoint, Adobe Flash CS5, Adobe Flash Builder, видеофайл.

Презентация – это набор последовательно сменяющих друг друга страниц – слайдов, на каждом из которых можно разместить любые текст, рисунки, схемы, видео - аудио фрагменты, анимацию, 3D – графику, фотографию, используя при этом различные элементы оформления.

Мультимедийная форма презентации позволяет представить материал как систему опорных образов, наполненных исчерпывающей структурированной информацией в алгоритмическом порядке.

Этапы подготовки мультимедийной презентации:

1. Структуризация материала по теме;
2. Составление сценария реализации;
3. Разработка дизайна презентации;
4. Подготовка медиа фрагментов (тексты, иллюстрации, видео, запись аудиофрагментов);
5. Подготовка музыкального сопровождения (при необходимости);
6. Тест-проверка готовой презентации.

3. Опрос

Опрос представляет собой совокупность развернутых ответов студентов на вопросы, которые они заранее получают от преподавателя. Опрос может проводиться в устной и письменной форме.

Подготовка к опросу включает в себя:

- изучение конспектов лекций, раскрывающих материал, знание которого проверяется опросом;
- повторение учебного материала, полученного при подготовке к семинарским, практическим занятиям и во время их проведения;
- изучение дополнительной литературы, в которой конкретизируется содержание проверяемых знаний;
- составление в мысленной форме ответов на поставленные вопросы.

4. Отчет по лабораторной работе

При составлении и оформлении отчета следует придерживаться рекомендаций, представленных в методических указаниях по выполнению лабораторных работ по дисциплине.

2. Описание процедуры промежуточной аттестации

Оценка за зачет/экзамен может быть выставлена по результатам текущего рейтинга. Текущий рейтинг – это результаты выполнения практических работ в ходе обучения, контрольных работ, выполнения заданий к лекциям (при наличии) и др. видов заданий.

Результаты текущего рейтинга доводятся до студентов до начала экзаменационной сессии.

Цель зачета – проверка и оценка уровня полученных студентом специальных знаний по учебной дисциплине и соответствующих им умений и навыков, а также умения логически мыслить, аргументировать избранную научную позицию, реагировать на дополнительные вопросы, ориентироваться в массиве информации.

Зачет может проводиться как в формате, аналогичном проведению экзамена, так и в других формах, основанных на выполнении индивидуального или группового задания, позволяющего осуществить контроль знаний и полученных навыков.

Подготовка к зачету начинается с первого занятия по дисциплине, на котором обучающиеся получают предварительный перечень вопросов к зачету и список рекомендуемой литературы, их ставят в известность относительно критериев выставления зачета и специфике текущей и итоговой аттестации. С самого начала желательно планомерно осваивать материал, руководствуясь перечнем вопросов к зачету и списком рекомендуемой литературы, а также путем самостоятельного конспектирования материалов занятий и результатов самостоятельного изучения учебных вопросов.

По результатам сдачи зачета выставляется оценка «зачтено» или «не зачтено».