

Документ подписан простой электронной подписью
 Информация о владельце:
 ФИО: ЧУМАЧЕНКО ТАТЬЯНА АЛЕКСАНДРОВНА
 Должность: РЕКТОР
 Дата подписания: 30.08.2022 10:45:20
 Уникальный программный ключ:
 9c9f7aaffa4840d284abe156657b8f85432bdb16




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

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА



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

| | |
|---|---|
| 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 |  |
| | | | | |
| | | | | |

ОГЛАВЛЕНИЕ

| | |
|--|----|
| 1. Пояснительная записка | 3 |
| 2. Трудоемкость дисциплины (модуля) и видов занятий по дисциплине (модулю) | 5 |
| 3. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий | 6 |
| 4. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины | 11 |
| 5. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю) | 12 |
| 6. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины | 17 |
| 7. Перечень образовательных технологий | 19 |
| 8. Описание материально-технической базы | 20 |

1. ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

1.1 Дисциплина «Информационные технологии в обучении химии» относится к модулю части, формируемой участниками образовательных отношений, Блока 1 «Дисциплины/модули» основной профессиональной образовательной программы по направлению подготовки 44.03.05 «Педагогическое образование (с двумя профилями подготовки)» (уровень образования бакалавр). Дисциплина является дисциплиной по выбору.

1.2 Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 72 час.

1.3 Изучение дисциплины «Информационные технологии в обучении химии» основано на знаниях, умениях и навыках, полученных при изучении обучающимися следующих дисциплин: «Аналитическая химия», «Иностранный язык», «Методика обучения и воспитания (по профилю подготовки химия)», «Математика», «Общая и неорганическая химия», «Органическая химия», «Основы математической обработки информации», «Проектная деятельность школьников по химии», «Физическая и коллоидная химия».

1.4 Дисциплина «Информационные технологии в обучении химии» формирует знания, умения и компетенции, необходимые для освоения следующих дисциплин: «Биологическая химия», «Биотехнология как альтернатива химической технологии», «Прикладная химия», «Химия высокомолекулярных соединений», для проведения следующих практик: «производственная практика (педагогическая)».

1.5 Цель изучения дисциплины:

Организовать изучение информационных технологий для становления специальной профессиональной компетентности учителя химии в области применения ИКТ в процессе обучения химии

1.6 Задачи дисциплины:

1) Формирование базовых знаний о современных ИКТ, необходимых для рациональной организации учебного процесса по химии, в условиях ИКТ-насыщенной среды;

2) Организация активной учебно-познавательной деятельности студентов, направленной на использование современных средств ИКТ для сопровождения учебного процесса по неорганической и органической химии;

3) Развитие умений студентов использовать современные ИКТ для проведения учебных занятий с учетом новых возможностей ЦОР по химии;

4) Развитие умений получать информацию, необходимую для решения поставленной задачи из различных источников: базы данных, литературные источники, Internet, общение с коллегами и т.д.;

5) продолжить формирование умений планировать и осуществлять проектно-исследовательскую работу с применением компьютерных технологий;

6) Сформировать умения отбирать эффективные приемы и методы работы на компьютерах при расчетах химических процессов

7) Развивать способности диагностирования полученных результатов с помощью различных программ и баз данных и на основе этого планировать и осуществлять деятельность по предмету.

8) научить активизировать учебно-познавательную деятельность школьников, используя современные ИКТ при проведении учебных занятий по химии с учетом специфики изучаемого материала.

1.7 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы:

| № п/п | Код и наименование компетенции по ФГОС |
|--|---|
| Код и наименование индикатора достижения компетенции | |
| 1 | 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 |
| | ПК.3.2 Умеет проектировать и разрабатывать элементы образовательной программы, рабочую программу по предмету/предметной области; проектировать содержание различных моделей обучения, воспитания и развития |
| | ПК.3.3 Владеет способами проектирования образовательных маршрутов разного уровня |
| 2 | 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. |
| | 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. |
| | УК.4.3 Владеет нормами деловой коммуникации на русском и иностранном(ых) языке(ах) в области устной и письменной речи |

| № п/п | Код и наименование индикатора достижения компетенции | Образовательные результаты по дисциплине |
|-------|---|--|
| 1 | ПК.3.1 Знает содержание и требования ФГОС, примерной программы по предмету/предметной области, особенности проектирования компонентов образовательной программы | 3.1 базовые понятия курса, химические программы, используемые в школьном обучении |
| 2 | 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 Умеет проектировать и разрабатывать элементы образовательной программы по предметной области |
| 3 | 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 химии |
| 1 | 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 достоинства и преимущества использования средств ИКТ в учебном процессе |
| 2 | 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 |
| 3 | УК 4.3 Владеет нормами деловой коммуникации на русском и иностранном(ых) языке(ах) в области устной и письменной речи | В.2 методами активизации учебно-познавательной деятельности на основе использования ИКТ в обучении химии |

2. ТРУДОЕМКОСТЬ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ) И ВИДОВ ЗАНЯТИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

| Наименование раздела дисциплины (темы) | Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах) | | | Итого часов |
|--|--|------------------|------------------|------------------|
| | Л | ЛЗ | СРС | |
| Итого по дисциплине | 12 | 20 | 40 | 72 |
| Первый период контроля | | | | |
| <i>Информационные технологии в обучении химии</i> | <i>12</i> | <i>20</i> | <i>40</i> | <i>72</i> |
| Базы данных и пакеты компьютерных программ (химических) | 2 | 2 | 6 | 10 |
| Визуализация в химии | 2 | 8 | 10 | 20 |
| Молекулярная механика в компьютерных расчетах | 8 | 10 | 24 | 42 |
| Итого по видам учебной работы | 12 | 20 | 40 | 72 |
| <i>Форма промежуточной аттестации</i> | | | | |
| Зачет | | | | |
| Итого за Первый период контроля | | | | 72 |

3. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ), СТРУКТУРИРОВАННОЕ ПО ТЕМАМ (РАЗДЕЛАМ) С УКАЗАНИЕМ ОТВЕДЕННОГО НА НИХ КОЛИЧЕСТВА АКАДЕМИЧЕСКИХ ЧАСОВ И ВИДОВ УЧЕБНЫХ ЗАНЯТИЙ

3.1 Лекции

| Наименование раздела дисциплины (модуля)/ Тема и содержание | Трудоемкость (кол-во часов) |
|--|--------------------------------|
| 1. Информационные технологии в обучении химии | 12 |
| Формируемые компетенции, образовательные результаты: ПК-3: 3.1 (ПК.3.1), У.1 (ПК.3.2), В.1 (ПК.3.3) УК-4: 3.2 (УК 4.1), У.2 (УК 4.2), В.2 (УК 4.3) | |
| 1.1. Базы данных и пакеты компьютерных программ (химических) Лекция 1. Введение в компьютерную химию (2 часа) План: 1. Компьютерная химия. 2. Информационные технологии в школьном химическом образовании. 3. Пакеты химических программ. 4. Базы данных. Учебно-методическая литература: 1, 2, 3 | 2 |
| 1.2. Визуализация в химии Лекция 2. Введение в компьютерную графику (2 часа) План: 1. Визуализация 2 D. 2. Визуализация 3 D. 3. Z-матрица. Учебно-методическая литература: 1, 2, 3 | 2 |
| 1.3. Молекулярная механика в компьютерных расчетах Лекция 3: Квантово-химические расчеты в химии (2 часа) 1. Методы молекулярной механики. 2. Полуэмпирические расчеты. 3. Методы Монте-Карло и Ланжевена. 4. Потенциальная поверхность реакции. Лекция 4-5: Измерение свойств молекулярной структуры (4 часа) 1. Способы измерения длин связей и углов между ними. 2. Техника определения некоторых характеристик атомов. 3. Изучение возможности использования собственных настроек параметров для свойств объектов. Лекция 6: Работа с макромолекулами (2 часа) 1. Методы чтения и открытия PDB файлов. 2. Определение различных характеристик макромолекул. 3. Визуальное представление на экране водородных связей и дисульфидных мостиков. 4. Моделирование виртуального мутагенеза определенной аминокислоты в макромолекуле. 5. Вращение заместителей белковой цепи. Учебно-методическая литература: 1, 2, 3 | 8 |

3.2 Лабораторные

| Наименование раздела дисциплины (модуля)/ Тема и содержание | Трудоемкость (кол-во часов) |
|---|--------------------------------|
| 1. Информационные технологии в обучении химии | 20 |
| Формируемые компетенции, образовательные результаты: ПК-3: 3.1 (ПК.3.1), У.1 (ПК.3.2), В.1 (ПК.3.3) УК-4: 3.2 (УК 4.1), У.2 (УК 4.2), В.2 (УК 4.3) | |

| | |
|--|---|
| <p>1.1. Базы данных и пакеты компьютерных программ (химических)</p> <p>Лабораторное занятие 1. Основы работы в компьютерных программах (2 часа)</p> <p>Цель работы: общее знакомство с компьютерной программой</p> <p>План:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Получить навыки начала работы с программой 2. Освоить способы использования мыши в данной программе. 3. Изучить технику работы с окнами. 4. Ознакомление с меню. 5. Отработать навыки открытия и копирования файлов в данной программе. 6. Отработать умения работы с ярлыками программы. 7. Изучить способы представления молекул. 8. Выполнение задания: ознакомиться с первоначальными понятиями работы в программе. Нарисовать и сохранить модель молекулы толуола в различных представлениях. Результат сохранить на электронном носителе. <p>Учебно-методическая литература: 1, 2, 3, 6</p> | 2 |
| <p>1.2. Визуализация в химии</p> <p>Лабораторное занятие 2. Основы рисования (создания) и методы редактирования (2 часа)</p> <p>Цель работы: получить навыки рисования и редактирования в программе</p> <p>План:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Освоить способы рисования атомов и связей. 2. Изучить методы выделения атомов и связей. 3. Изучить методы удаления объектов. 4. Изучить способы очистки визуального пространства и копирования объектов. 5. Выполнение задания: изучить приемы рисования и методы редактирования, которые вы сможете использовать позже, для создания 2D-эскиза молекулы на примере различных молекул: воды, аммиака, анилина, серной кислоты. Результат сохранить на электронном носителе. <p>Лабораторное занятие 3. Создание молекул в 2-D и 3-D изображении (2 часа)</p> <p>Цель работы: познакомиться с методами создания небольших молекул.</p> <p>План работы:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Познакомиться со способом создания 2-D эскиза молекулы. 2. Научиться редактировать связи и атомы. 3. Освоить методику использования модуля 3-D. 4. Научиться использовать конфигуратор модели 3-D Model Builder 5. Научиться сохранять созданные в программе структуры. 6. Выполнение задания: создать молекулу 1-гидрокси-3-фенил-2-пропена в 2-D и 3-D изображении. Результат сохранить на электронном носителе. <p>Литература: 1, 4, 5, 7.</p> <p>Лабораторное занятие 4-5. Перемещение, вращение и масштабирование молекул (4 часа)</p> <p>Цель работы: освоить различные способы перемещения молекул на экране, используя инструменты для вращения, перемещения и увеличения.</p> <p>План:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Освоить технику перемещения объектов относительно x, y и z осей. 2. Освоить технику вращения объектов относительно x, y и z осей. 3. Изучить методы приближения и удаление молекул с помощью инструмента Zoom 4. Освоить способы изменения размеров молекул с помощью плиты Z-отрезания. 5. Сосредоточивание и масштабирование молекулы. 6. Выполнение задания: осуществить перемещение молекул на экране, используя инструменты для вращения, перемещения и увеличения на примере фенилуксусной кислоты. Результат сохранить на электронном носителе. <p>Учебно-методическая литература: 1, 2, 3, 6</p> | 8 |

| | |
|---|----|
| <p>1.3. Молекулярная механика в компьютерных расчетах</p> <p>Лабораторное занятие 6-7. Создание молекулы полипептидов (4 часа)</p> <p>Цель работы: получить навыки компьютерного моделирования на примере небольшой биологической молекулы.</p> <p>План:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Научиться соединять остатки аминокислот из шаблонов. 2. Освоить метод создания цвиттериона из нейтральной молекулы. 3. Отработать навыки проведения виртуального мутагенеза в определенном месте полипептида. 4. Выполнение задания: создать молекулу полипептида, по-следовательно выбирая шаблоны остатков, имеющихся в библиотеке аминокислот, на примере молекулы белка – брадикинина. Результат сохранить на электронном носителе <p>Лабораторное занятие 8-9. Одновременное выделение и демонстрация нескольких объектов (4 часа)</p> <p>Цель работы: освоить технику одновременной работы с несколькими объектами</p> <p>План:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Создание α-спирали полипептида. 2. Научиться выделять одновременно несколько объектов: типа основ, колец и заместителей. 3. Освоить технику установки обозначений и изменения окраски для выделенных объектов. <p>Задание: изучить способы выбора (выделять) и демонстрации одновременно несколько объектов, используя, альфа-спиральную конформацию полипептида (РНЕ)6. Результат сохранить на электронном носителе</p> <p>Лабораторное занятие 13. Оптимизация геометрии молекулярной системы (2 часа)</p> <p>Цель работы: с помощью компьютерного моделирования осуществить поиск наиболее устойчивых молекулярных структур для молекулы циклогексана.</p> <p>План:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Изучить способ оптимизации геометрии молекулы методом молекулярной механики. 2. Провести одноточечные вычисления на отдельной молекуле. 3. Научиться измерять длины торзионных связей. 4. Научиться измерять и проводить сравнения структурных свойств системы. 5. Освоить метод использования виртуального отражения через определенную плоскость. 6. Использование отражения через определенную плоскость для конфигуратора модели 7. Выполнение задания: используя различные алгоритмы, провести оптимизацию геометрии (поиск такой молекулярной структуры, при которой система имеет наименьшее значение энергии) для молекулы цикло-гексана, три стационарные точки: кресло, ванна, и твист-ванна. Для каждой формы выполнить оптимизацию молекулярной механикой и сравнить вычисленные энергии для нахождения конформации с глобальным минимумом. Результат сохранить на электронном носителе. <p>Учебно-методическая литература: 1, 2, 3, 4, 6</p> | 10 |
|---|----|

3.3 СРС

| Наименование раздела дисциплины (модуля)/ Тема для самостоятельного изучения | Трудоемкость (кол-во часов) |
|---|--------------------------------|
| 1. Информационные технологии в обучении химии | 40 |
| Формируемые компетенции, образовательные результаты: | |
| ПК-3: 3.1 (ПК.3.1), У.1 (ПК.3.2), В.1 (ПК.3.3) | |
| УК-4: 3.2 (УК 4.1), У.2 (УК 4.2), В.2 (УК 4.3) | |

| | |
|---|----|
| <p>1.1. Базы данных и пакеты компьютерных программ (химических)</p> <p>Задание для самостоятельного выполнения студентом:</p> <p>Теоретическая подготовка к лабораторному занятию 1 по следующим вопросам:</p> <p>Основные положения классической теории химического строения. Структурная формула и граф молекулы. Изомерия. Конформации молекул. Связь строения и свойств молекул.</p> <p>Физические основы учения о строении молекул</p> <p>Оформление и подготовка отчета по лабораторной работе "Основы работы в компьютерных программах по химии".</p> <p>Подготовка мультимедийной презентации на занятие по одной из тем:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Электронные таблицы. Принципы организации электронных таблиц. Структура документов MS Excel. Обмен данными. Работа с текстовыми данными. Создание баз данных 2. Пакеты прикладных программ. Пакеты химических прикладных программ. Подпрограммы и пакеты программ для решения комбинаторных задач, применение в химии. 3. Компьютерное моделирование. <p>Учебно-методическая литература: 1, 2, 3, 4, 5, 6</p> <p>Профессиональные базы данных и информационные справочные системы: 1, 2</p> | 6 |
| <p>1.2. Визуализация в химии</p> <p>Задание для самостоятельного выполнения студентом:</p> <p>Теоретическая подготовка к лабораторным занятиям 2-5 по следующим вопросам:</p> <p>Классификация моделей и моделирования.</p> <p>Классификация моделей и моделирования по признаку "характер моделируемой стороны объекта".</p> <p>Классификация моделей и моделирования по признаку "способ реализации модели".</p> <p>Этапы моделирования.</p> <p>Адекватность модели.</p> <p>Дискретные марковские процессы.</p> <p>Сущность и цели планирования эксперимента.</p> <p>Формальный подход к сокращению общего числа прогонов.</p> <p>Элементы тактического планирования.</p> <p>Точность и количество реализаций модели при определении средних значений параметров.</p> <p>Характеристики случайных величин и процессов.</p> <p>Требования к оценкам характеристик.</p> <p>Оценка характеристик случайных величин и процессов.</p> <p>Выявление несущественных факторов.</p> <p>Какими методами производится поиск зависимостей типа «структура — свойство»?</p> <p>Каким образом проводится генерация наборов химических структур, отвечающих заданным параметрам</p> <p>Оформление и подготовка отчета по лабораторным работам "Основы рисования (создания) и методы редактирования".</p> <p>"Создание молекул в 2-D и 3-D изображениях".</p> <p>"Перемещение, вращение и масштабирование молекул".</p> <p>Подготовка мультимедийной презентации на занятие по одной из тем:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Оцифровка, программная генерация. Графическое оборудование. 2. Генерация моделей: примитивы, модификация примитивов, криволинейные поверхности. 3. Рендеринг 2D графика и вывод натуральных снимков. 4. 3D модели, объемный рендеринг, анимация. 5. Реалистичный рендеринг. Методы закраски 6. Использование освещения. Типы источников света <p>Учебно-методическая литература: 1, 2, 3, 4, 5, 6</p> <p>Профессиональные базы данных и информационные справочные системы: 1, 2</p> | 10 |

| | |
|--|-----------|
| <p>1.3. Молекулярная механика в компьютерных расчетах</p> <p>Задание для самостоятельного выполнения студентом:</p> <p>Теоретическая подготовка к лабораторным занятиям 6-9. по следующим вопросам: Постановка задачи. Исходные данные. Задание на исследование. Программа модели. Проведение экспериментов В каких случаях проводится сочетание методов квантовой химии и молекулярной механики В каких случаях для поиска решений применяются методы искусственного интеллекта. Что такое поверхность потенциальной энергии молекулы и каковы её основные характерные особенности? В чем заключается метод Хартри-Фока для решения электронного уравнения? Метод функционала плотности, его основные особенности. Что Вы знаете о современных полуэмпирических методах квантовой химии? Метод Хюккеля. Привести пример расчета этим методом какой-либо простой молекулярной системы (бутадиен, циклобутадиен, метилциклопропен, бензол). Путь реакции и координата реакции на потенциальной поверхности. Что это такое?</p> <p>Оформление и подготовка отчета по лабораторной работе "Создание молекулы полипептидов". "Одновременное выделение и демонстрация нескольких объектов". "Оптимизация геометрии молекулярной системы"</p> <p>Подготовка мультимедийной презентации на занятие по одной из тем:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Визуализация электростатического потенциала молекул 2. Молекулярная механика и квантовая химия. Переносимость параметров молекулярной механики. 3. Общая стратегия исследования механизма химической реакции методами квантовой химии. Выводы о механизме реакции из анализа реакционного пути. 4. Моделирование динамики и состояния равновесия. 5. Вычисление энергии молекулярных орбиталей. 6. Взаимодействие воды с N-метилацетамидом. 7. Электронные свойства белков. 8. Протонирование молекул воды и аммиака <p>Подготовка конспекта внеклассного мероприятия по химии по одной из предложенных тем.</p> <p>Учебно-методическая литература: 1, 2, 4, 5, 6 Профессиональные базы данных и информационные справочные системы: 1, 2</p> | <p>24</p> |
|--|-----------|

4. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Учебно-методическая литература

| № п/п | Библиографическое описание (автор, заглавие, вид издания, место, издательство, год издания, количество страниц) | Ссылка на источник в ЭБС |
|----------------------------------|---|---|
| Основная литература | | |
| 1 | Информационные технологии в образовании: лабораторный практикум [Электронный ре-сурс] : учебное пособие / И.Н. Власова [и др.]. — Электрон. текстовые данные. — Пермь: Пермский государственный гуманитарно-педагогический университет, 2015. — 100 с. — 2227-8397. | http://www.iprbookshop.ru/70624.html |
| 2 | Киселев Г.М. Информационные технологии в педагогическом образовании [Электронный ресурс] : учебник для бакалавров / Г.М. Киселев, Р.В. Бочкова. — Электрон. текстовые дан-ные. — М. : Дашков и К, 2014. — 304 с. — 978-5-394-02365-1. | http://www.iprbookshop.ru/10924.html |
| 3 | Основы информационных технологий [Электронный ресурс] / С.В. Назаров [и др.]. — Элек-трон. текстовые данные. — Москва : Интернет-Университет Информационных Технологий (ИНТУИТ), 2016. — 530 с. — 2227-8397. | http://www.iprbookshop.ru/52159.html |
| Дополнительная литература | | |
| 4 | Зайцев Б.Е. Применение ИК-спектроскопии в химии [Электронный ресурс] : учебное посо-бие / Б.Е. Зайцев, О.В. Ковальчукова, С.Б. Страшнова. — Электрон. текстовые данные. — М. : Российский университет дружбы народов, 2008. — 152 с. — 978-5-209-03292-2. | http://www.iprbookshop.ru/11418.html |
| 5 | Лизунов Ю.В. Осторожно, компьютер [Электронный ресурс] : рекомендации по сохранению здоровья пользователей компьютеров / Ю.В. Лизунов. — Электрон. текстовые данные. — СПб. : СпецЛит, 2009. — 47 с. — 978-5-299-00408-3. | http://www.iprbookshop.ru/47822.html |
| 6 | Уроки работы в NureChem. / Меньшиков В.В., Сутягин А.А. – Челябинск, 2007. – 212 с | |

4.2. Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

| № п/п | Наименование базы данных | Ссылка на ресурс |
|----------|--|---|
| 1 | Естественнонаучный образовательный портал | http://www.en.edu.ru |
| 2 | Единое окно доступа к образовательным ресурсам | http://window.edu.ru |

5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

5.1. Описание показателей и критериев оценивания компетенций

| Код компетенции по ФГОС | | | | | |
|--|----------------------------|-------|------------------------------|----------------------------------|--------------------------|
| Код образовательного результата дисциплины | Текущий контроль | | | | Промежуточная аттестация |
| | Мультимедийная презентация | Опрос | Отчет по лабораторной работе | Конспект внеучебного мероприятия | Зачет/Экзамен |
| ПК-3 | | | | | |
| 3.1 (ПК.3.1) | | | + | | + |
| У.1 (ПК.3.2) | | | | + | + |
| В.1 (ПК.3.3) | | + | + | | + |
| УК-4 | | | | | |
| 3.2 (УК 4.1) | + | + | | | + |
| У.2 (УК 4.2) | | | + | | + |
| В.2 (УК 4.3) | + | | | | + |

5.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.

5.2.1. Текущий контроль.

Типовые задания к разделу "Информационные технологии в обучении химии ":

1. Конспект внеучебного мероприятия

Тематика конспектов внеклассных мероприятий по химии:

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

Количество баллов: 10

2. Мультимедийная презентация

Тематика мультимедийных презентаций (одна презентация в теме по выбору студента)

Тема 1 Базы данных и пакеты компьютерных программ (химических)

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.

Тема 2 Визуализация в химии

- 1.Оцифровка, программная генерация. Графическое оборудование.
2. Генерация моделей: примитивы, модификация примитивов, криволинейные поверхности.
3. Рендеринг 2D графика и вывод натуральных снимков.
4. 3D модели, объемный рендеринг, анимация.
5. Реалистичный рендеринг. Методы закраски
- 6.Использование освещения. Типы источников света

Тема 3 Молекулярная механика в компьютерных расчетах

1. Визуализация электростатического потенциала молекул
- 2.Молекулярная механика и квантовая химия. Переносимость параметров молекулярной механики.
3. Общая стратегия исследования механизма химической реакции методами квантовой химии. Выводы о механизме реакции из анализа реакционного пути.
4. Моделирование динамики и состояния равновесия.

Количество баллов: 6

3. Опрос

Вопросы для опроса по теме 1 «Базы данных и пакеты компьютерных программ(химических)»

Сформулируйте основные категории и понятия, описывающие методы хранения информации.

Каковы основные требования к переработке информации.

Сформулируйте основные критерии качества информации.

Сформулируйте способы использования баз данных в своей деятельности.

Как определить методы выбора оптимальных методов поиска и отбора информации

Как критически оценивать источники информации.

Как классифицировать и обобщать данные? Какие способы для этого осуществимы?

Какие существуют методы первичной статистической обработки информации?

Как можно использовать базы данных в своей деятельности?

Как можно адекватно использовать известные носители информации?

Какие методы используются при решении проблем изоморфизма графов?

Вопросы для опроса по теме 2 «Визуализация в химии»

Классификация моделей и моделирования.

Классификация моделей и моделирования по признаку "характер моделируемой стороны объекта".

Классификация моделей и моделирования по признаку "способ реализации модели".

Этапы моделирования.

Адекватность модели.

Дискретные марковские процессы.

Сущность и цели планирования эксперимента.

Формальный подход к сокращению общего числа прогонов.

Элементы тактического планирования.

Точность и количество реализаций модели при определении средних значений параметров.

Характеристики случайных величин и процессов.

Требования к оценкам характеристик.

Оценка характеристик случайных величин и процессов.

Выявление несущественных факторов.

Какими методами производится поиск зависимостей типа «структура — свойство»?

Каким образом проводится генерация наборов химических структур, отвечающих заданным параметрам

Вопросы для опроса по теме 3 «Молекулярная механика в компьютерных расчетах»

Постановка задачи. Исходные данные.

Задание на исследование.

Программа модели.

Проведение экспериментов.

В каких случаях проводятся сочетание методов квантовой химии и молекулярной механики

В каких случаях для поиска решений применяются методы искусственного интеллекта.

Что такое поверхность потенциальной энергии молекулы и каковы её основные характерные особенности?

В чем заключается метод Хартри-Фока для решения электронного уравнения?

Метод функционала плотности, его основные особенности.

Что Вы знаете о современных полуэмпирических методах квантовой химии?

Метод Хюккеля. Привести пример расчета этим методом какой-либо простой молекулярной системы (бутадиен, циклобутадиен, метилениклопропен, бензол).

Путь реакции и координата реакции на потенциальной поверхности. Что это такое?

Количество баллов: 15

4. 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 компьютерных программах по химии".

"Основы рисования (создания) и методы редактирования".

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

"Перемещение, вращение и масштабирование молекул".

"Создание молекулы полипептидов".

"Одновременное выделение и демонстрация нескольких объектов".

"Оптимизация геометрии молекулярной системы"

Количество баллов: 70

5.2.2. Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о текущем контроле и промежуточной аттестации в ФГБОУ ВО «ЮУрГГПУ».

Первый период контроля

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 полумэмпирические методы в компьютерных расчетах

20. Водородная связь. Расчеты и визуализация.
 21. Конформационный анализ и динамика
 22. Компьютерное моделирование межмолекулярных взаимодействий. Виды невалентных взаимодействий.

5.3. Примерные критерии оценивания ответа студентов на экзамене (зачете):

| Отметка | Критерии оценивания |
|---|---|
| "Отлично" | <ul style="list-style-type: none"> - дается комплексная оценка предложенной ситуации - демонстрируются глубокие знания теоретического материала и умение их применять - последовательное, правильное выполнение всех заданий - умение обоснованно излагать свои мысли, делать необходимые выводы |
| "Хорошо" | <ul style="list-style-type: none"> - дается комплексная оценка предложенной ситуации - демонстрируются глубокие знания теоретического материала и умение их применять - последовательное, правильное выполнение всех заданий - возможны единичные ошибки, исправляемые самим студентом после замечания преподавателя - умение обоснованно излагать свои мысли, делать необходимые выводы |
| "Удовлетворительно" ("зачтено") | <ul style="list-style-type: none"> - затруднения с комплексной оценкой предложенной ситуации - неполное теоретическое обоснование, требующее наводящих вопросов преподавателя - выполнение заданий при подсказке преподавателя - затруднения в формулировке выводов |
| "Неудовлетворительно" ("не зачтено") | <ul style="list-style-type: none"> - неправильная оценка предложенной ситуации - отсутствие теоретического обоснования выполнения заданий |

6. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

1. Лекции

Лекция - одна из основных форм организации учебного процесса, представляющая собой устное, монологическое, систематическое, последовательное изложение преподавателем учебного материала с демонстрацией слайдов и фильмов. Работа обучающихся на лекции включает в себя: составление или слежение за планом чтения лекции, написание конспекта лекции, дополнение конспекта рекомендованной литературой.

Требования к конспекту лекций: краткость, схематичность, последовательная фиксация основных положений, выводов, формулировок, обобщений. В конспекте нужно помечать важные мысли, выделять ключевые слова, термины. Последующая работа над материалом лекции предусматривает проверку терминов, понятий с помощью энциклопедий, словарей, справочников с выписыванием толкований в тетрадь. В конспекте нужно обозначить вопросы, термины, материал, который вызывает трудности, пометить и попытаться найти ответ в рекомендуемой литературе. Если самостоятельно не удастся разобраться в материале, необходимо сформулировать вопрос и задать преподавателю на консультации, на практическом занятии.

2. Лабораторные

Лабораторные занятия проводятся в специально оборудованных лабораториях с применением необходимых средств обучения (лабораторного оборудования, образцов, нормативных и технических документов и т.п.).

При выполнении лабораторных работ проводятся: подготовка оборудования и приборов к работе, изучение методики работы, воспроизведение изучаемого явления, измерение величин, определение соответствующих характеристик и показателей, обработка данных и их анализ, обобщение результатов. В ходе проведения работ используются план работы и таблицы для записей наблюдений.

При выполнении лабораторной работы студент ведет рабочие записи результатов измерений (испытаний), оформляет расчеты, анализирует полученные данные путем установления их соответствия нормам и/или сравнения с известными в литературе данными и/или данными других студентов. Окончательные результаты оформляются в форме заключения.

3. Зачет

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.

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

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

4. Отчет по лабораторной работе

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

5. 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.

6. 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.

7. 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.

7. ПЕРЕЧЕНЬ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

1. Цифровые технологии обучения
2. Проблемное обучение

8. ОПИСАНИЕ МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ БАЗЫ

1. компьютерный класс – аудитория для самостоятельной работы
2. учебная аудитория для лекционных занятий
3. компьютерный класс
4. Лицензионное программное обеспечение:
 - Операционная система Windows 10
 - Microsoft Office Professional Plus
 - Антивирусное программное обеспечение Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный Russian Edition
 - Справочная правовая система Консультант плюс
 - 7-zip
 - Adobe Acrobat Reader DC