

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 «ЮУнГПУ»)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА



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

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 | 12 |
| 5. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю) | 13 |
| 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 предметном обучении» 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 предметном обучении» основано на знаниях, умениях и навыках, полученных при изучении обучающимися следующих дисциплин: «Аналитическая химия», «Биоорганическая химия», «Избранные главы биологии клетки», «Методика обучения и воспитания (по профилю подготовки химия)», «Методика решения задач школьного курса химии», «Общая и неорганическая химия», «Органическая химия», «Цифровые технологии в образовании», «Химия биологически важных соединений».

1.4 Дисциплина «Информационные технологии в предметном обучении» формирует знания, умения и компетенции, необходимые для освоения следующих дисциплин: «Биологическая химия», «Биотехнология как альтернатива химической технологии», «Органический синтез», «Химия высокомолекулярных соединений».

1.5 Цель изучения дисциплины:

содействие становлению специальной профессиональной компетентности будущего учителя в области применения ИКТ в процессе предметного обучения химии, биологии.

1.6 Задачи дисциплины:

1) Изучение состояния компьютерных программ используемых в образовательном процессе при изучении химических явлений на молекулярном уровне

2) формирование базовых знаний о современных ИКТ и программах, необходимых для рациональной организации учебного процесса по предмету, в условиях ИКТ-насыщенной среды;

3) формирование умений организации активной учебно-познавательной деятельности школьников и студентов, направленной на использование современных средств ИКТ для сопровождения учебного процесса по предмету

4) развитие умений студентов использовать современные ИКТ для проведения учебных и внеурочных занятий с учетом новых возможностей ЦОР по химии.

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: информатизация образования, информационно-коммуникационные технологии обучения; программное обеспечение, его классификация, дидактические задачи, решаемые посредством использования ИКТ; |

| | | |
|---|---|---|
| 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 применять свои знания в области использования ИКТ на различных этапах уроков и других формах организации учебных занятий; |
| 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 дисциплины; |
| 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 преимущества использования средств ИКТ в учебном процессе по химии, биологии. |
| 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 развития творческих способностей с применением ИКТ в работе с обучающимися. |

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 предметном обучении</i> | <i>12</i> | <i>20</i> | <i>40</i> | <i>72</i> |
| Работа с компьютером в типовых расчетных программах | 2 | 2 | 6 | 10 |
| Визуализация моделей химических объектов | 2 | 8 | 10 | 20 |
| Квантово-химические расчеты | 8 | 10 | 24 | 42 |
| Итого по видам учебной работы | 12 | 20 | 40 | 72 |
| Форма промежуточной аттестации | | | | |
| 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 предметном обучении | 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. Работа с компьютером в типовых расчетных программах Лекция 1. Введение в компьютерную химию (2 часа) План: 1. Компьютерная химия. 2. Информационные технологии в школьном химическом образовании 3. Пакеты химических программ (HyperChem, ChemOffice) 4. Базы данных по химии, биологии. 5. Визуализация 2 D и 3 D. 6. Z-матрица. Учебно-методическая литература: 1, 2, 3 | 2 |
| 1.2. Визуализация моделей химических объектов Лекция 2. Перемещение, вращение и масштабирование молекул (2 часа) 1. Техника перемещения объектов относительно x, y и z осей. 2. Техника вращения объектов относительно x, y и z осей. 3. Методы увеличения и уменьшения размеров молекул. 4. Способы изменения размеров плиты Z-сечения. Учебно-методическая литература: 1, 2, 3 | 2 |
| 1.3. Квантово-химические расчеты Лекция 3: Методы молекулярной механики (2 часа) 1. Применение методов молекулярной механики для квантово-химических расчетов в химии и биологии. Лекция 4: Полуэмпирические расчеты. (2 часа) 1. Квантово-химические расчеты в химии, биологии. Лекция 5: Квантово-химические расчеты в химии и биологии (2 часа) 1. Методы Монте-Карло и Ланжевена. 2. Потенциальная поверхность реакции. Лекция 6: Исследование конформаций и динамики молекул методами классической механики (2 часа) 1. Изучение зависимости потенциальной энергии бутана от угла внутреннего вращения. 2. Построения графика потенциальной кривой. 3. Построение графика зависимости энергии от угла внутреннего вращения на примере бутана. 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 предметном обучении | 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. Работа с компьютером в типовых расчетных программах Лабораторное занятие 1. Основы работы в программах по обработке баз данных (2 часа) Цель работы: общее знакомство с расчетной программой План: 1. Получить навыки начала работы с программами. 2. Освоить способы использования мыши. 3. Изучить технику работы с окнами. 4. Ознакомление с меню. 5. Отработать навыки открытия и копирования файлов. 6. Отработать умения работы с ярлыками программ. 7. Изучить способы представления молекул. 8. Рисунки химической посуды и приборов Задание ознакомиться с первоначальными понятиями работы в программе. Нарисовать и сохранить модель молекулы толуола в различных представлениях. Результат сохранить на электронном носителе.</p> <p>Учебно-методическая литература: 1, 2, 3, 6</p> | 2 |
| <p>1.2. Визуализация моделей химических объектов Лабораторные занятия 2-3. Основы рисования (создания) и методы редактирования (4 часа) Цель работы: знакомство с основами рисования и редактирования в программах: 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. Задание: изучить приемы рисования и методы редактирования, которые вы сможете использовать позже, для создания 2D-эскиза молекулы. Создать молекулы неорганических кислот в различных формах. Результат сохранить на электронном носителе.</p> <p>Лабораторное занятие 4. Создание молекул в 2-D и 3-D изображении (2 часа) Цель работы: познакомиться с методами создания небольших молекул. План: 1. Познакомиться со способом создания 2-D эскиза молекулы. 2. Научиться редактировать связи и атомы. 3. Освоить методику использования 3-D модуля. 4. Научиться сохранять созданные в программе структуры. Задание: создать молекулы фенолфталеина и флуоресцеина Результат сохранить на электронном носителе.</p> <p>Лабораторное занятие 5 . Измерение свойств молекулярной структуры (2 часа) Цель работы: освоить методы измерения свойств молекулярной структуры. План: 1. Изучить способы измерения длин связей и углов между ними. 2. Овладеть техникой определения некоторых характеристик атомов. 3. Изучить возможности использования собственных настроек параметров для свойств объектов. Задание: описать измерение свойств молекулярной структуры фенолфталеина, используя различные методы выделения. Выбирая различные части молекулы или группы молекул, научиться измерять длины связей и углы и также показывать различные характеристики атома, тип заряда и расположения на x, y, и z координатах Задание: описать измерение свойств молекулярной структуры, используя различные методы выделения. Выбирая различные части молекулы или группы молекул, измерить длины связей и углы и также показать различные характеристики атома, тип заряда и расположения на x, y, и z координатах на примере нитробензола. Данные оформить в виде таблицы в Word.Результат сохранить на электронном носителе.</p> <p>Учебно-методическая литература: 1, 2, 3, 6</p> | 8 |

| | |
|---|----|
| <p>1.3. Квантово-химические расчеты</p> <p>Лабораторные занятия 6-7. Электронные состояния этилена (4 часа)</p> <p>Цель работы Получаемые в этом уроке навыки:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Исследование энергии орбиталей и схематическое изображение их для молекулы, 2. Выполнение отдельно-возбужденных вычислений с конфигурационным взаимодействием, 3. Исследование электронных спектров молекул, 4. Вычисление геометрии возбужденного триплетного состояния, 5. Расчет ИК-спектров <p>Задание: Ознакомиться с методами электронных расчетов основных и возбужденных состояний молекулы пропилена в программе HyperChem Результат измерений сохранить на электронном носителе World.</p> <p>Лабораторные занятия 8-9. Смешение вычислительных методов (4 часа)</p> <p>Цель работы: освоить технику одновременной работы с несколькими объектами и смешения вычислительных методов на одной молекуле</p> <p>План:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Освоить технику использования разных методов вычисления энергии для различных частей молекулярной модели. 2. Смешение вычислительных алгоритмов при исследовании поведения молекул в различных растворах. 3. Сравнение геометрии и распределения частичных зарядов на атомах одной молекулы, рассчитанные полуэмпирическим методом CNDO, в вакууме и в водном растворе. 4. Научиться использовать для расчетов в растворах ячейки периодичности. 5. Научиться строить двумерный и трехмерный графики распределения по результатам квантово-химического расчета различными методиками квантовохимических измерений. <p>Задание: Провести измерения на молекуле уксусной кислоты путем смешения вычислительных алгоритмов в различных растворах. Результат измерений сохранить на электронном носителе в программе Excel.</p> <p>Лабораторное занятие 10. Оптимизация геометрии молекулярной системы (2 часа)</p> <p>Цель работы: с помощью компьютерного моделирования осуществить поиск наиболее устойчивых молекулярных структур для молекулы фенилаланина.</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. <p>Задание: используя различные алгоритмы, провести оптимизацию геометрии (поиск такой молекулярной структуры, при которой система имеет наименьшее значение энергии) для молекулы фенилаланина, 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> <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 предметном обучении | 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. Работа с компьютером в типовых расчетных программах</p> <p>Задание для самостоятельного выполнения студентом:</p> <p>Теоретическая подготовка к лабораторному занятию 1 по следующим вопросам:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Основные положения классической теории химического строения. Структурная формула и граф молекулы. Изомерия. 2. Конформации молекул. Связь строения и свойств молекул. 3. Физические основы учения о строении молекул. <p>Оформление и подготовка отчета по лабораторной работе "Основы работы в программах по обработке баз данных".</p> <p>Подготовка мультимедийной презентации на занятие по одной из тем:</p> <ol style="list-style-type: none"> 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. <p>Учебно-методическая литература: 1, 2, 3, 5, 6</p> <p>Профессиональные базы данных и информационные справочные системы: 1, 2, 3</p> | 6 |
|---|---|

| | |
|---|-----------|
| <p>1.2. Визуализация моделей химических объектов</p> <p>Задание для самостоятельного выполнения студентом:</p> <p>Теоретическая подготовка к лабораторным занятиям 2-5 по следующим вопросам:</p> <ol style="list-style-type: none"> 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. <p>Оформление и подготовка отчета по лабораторным работам "Основы рисования (создания) и методы редактирования". "Создание молекул в 2-D и 3-D изображениях".</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. 3D модели, объемный рендеринг, анимация. 4. Реалистичный рендеринг. Методы закраски. 5. Визуализация электростатического потенциала молекул. <p>Учебно-методическая литература: 1, 2, 3, 5, 6 Профессиональные базы данных и информационные справочные системы: 1, 2, 3</p> | <p>10</p> |
|---|-----------|

Теоретическая подготовка к лабораторным занятиям 6-9.

по следующим вопросам:

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. Реализация общего метода молекулярной механики.
4. Универсальные и специализированные потенциалы MM2, MMX, PM3, AMBER и др.
5. Базисные наборы. Выбор базисного набора.
6. Методы вычисления 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. Использование периодических граничных условий в компьютерных расчетах.
14. Моделирование влияния растворителя на свойства 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 выявления 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 полумэмпирические методы в компьютерных расчетах
26. Методы в компьютерных расчетах
27. Методы пренебрежения дифференциальным перекрытием
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

Оформление и подготовка отчета по лабораторной работе

"Измерение свойств молекулярной структуры".

"Электронные состояния этилена".

"Смещение вычислительных методов".

"Оптимизация геометрии молекулярной системы"

Подготовка мультимедийной презентации на занятие по одной из тем:

1. Молекулярная механика и квантовая химия. Переносимость параметров молекулярной механики.
2. Молекулярная динамика.
3. Динамика Ланжевена.
4. Методы Монте-Карло.

Подготовка конспекта внеклассного мероприятия по химии по одной из предложенных тем.

Учебно-методическая литература: 1, 2, 3, 4, 5, 6

Профессиональные базы данных и информационные справочные системы: 1, 2, 3

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 | Единое окно доступа к образовательным ресурсам | http://window.edu.ru |
| 2 | Естественнонаучный образовательный портал | http://www.en.edu.ru |
| 3 | Библиотека химического факультета МГУ | http://www.chem.msu.ru/rus/library |

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 предметном обучении ":

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.

Количество баллов: 10

2. 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, MORAC, 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.

Количество баллов: 6

3. 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, закрашка, 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 вычисления 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. Использование периодических граничных условий в компьютерных расчетах.
14. Моделирование влияния растворителя на свойства 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 полумэмпирические методы в компьютерных расчетах
26. методы в компьютерных расчетах
27. Методы пренебрежения дифференциальным перекрытием

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 программах по обработке баз данных ".

"Основы рисования (создания) и методы редактирования".

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

"Измерение свойств молекулярной структуры ".

"Электронные состояния этилена ".

"Смещение вычислительных методов ".

"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. Использование 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.

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. Развивающее 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