



Факультет	Естественных наук
Кафедра	Химии
Направление подготовки	44.04.01 Педагогическое образование
Направленность (профиль)	Образование в области органической химии
Компьютерное моделирование химических процессов	Б1.В.ДВ.06.02

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого»
ФГБОУ ВО «ТГПУ им. Л.Н. Толстого»

УТВЕРЖДЕНА
на заседании
Ученого совета университета
протокол № 8 от 31 августа 2017 г.

Рабочая программа дисциплины «Компьютерное моделирование химических процессов»

Трудоемкость: 3 зачетные единицы

Квалификация выпускника: Магистр

Форма обучения: очная

Год начала подготовки: 2016, 2017

Заведующий кафедрой химии  Ю.М. Атрощенко

Декан ФЕН

 И.В. Шахельдян

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	3
2. Место дисциплины в структуре ОПОП магистратуры	4
3. Объем дисциплины и виды учебной работы.....	4
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических или астрономических часов и видов учебных занятий	4
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	6
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине	6
6.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы.....	6
6.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания	6
6.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы.....	8
6.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций	8
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	9
7.1. Основная литература	9
7.2. Дополнительная литература	9
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.....	9
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины	10
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем	10
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	12
12. Аннотация рабочей программы дисциплины.	13
13. Лист регистрации изменений к рабочей программе дисциплины	15
Разработчик.....	16

1. ПЕРЕЧЕНЬ ПЛАНИРУЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫХ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Достижение планируемых результатов обучения, соотнесенных с общими целями и задачами ОПОП, является целью освоения дисциплины.

Планируемые результаты освоения образовательной программы (код и название компетенции)	Планируемые результаты обучения	Этапы формирования компетенции в процессе освоения образовательной программы
ОК-3 способностью к самостоятельному освоению и использованию новых методов исследования, к освоению новых сфер профессиональной деятельности	<p>Выпускник знает: теоретические основы информационных технологий и методов компьютерного моделирования в химии</p> <p>Умеет: использования различных методов для компьютерного моделирования и интерпретации полученных результатов</p> <p>Владеет и (или) имеет опыт деятельности: навыками работы в компьютерных программах по моделированию, в том числе и молекулярному</p>	в соответствии с учебным планом и планируемые результатами освоения ОПОП
ОК-4 способность формировать ресурсно-информационные базы для осуществления практической деятельности различных сферах	<p>Выпускник знает: теоретические основы создания баз данных в области химии</p> <p>Умеет: планировать и создавать химическую базу данных</p> <p>Владеет и (или) имеет опыт деятельности: навыками работы в компьютерных программах по созданию химических баз данных</p>	в соответствии с учебным планом и планируемые результатами освоения ОПОП
ОК- 5 способность самостоятельно приобретать и использовать, в том числе с помощью информационных технологий, новые знания и умения, непосредственно не связанные со сферой профессиональной деятельности	<p>Выпускник знает: теоретические основы информационных технологий, связанных с профессиональной деятельностью, в том числе молекулярного моделирования</p> <p>Умеет: использовать теоретические знания в области информационных технологий для молекулярного моделирования</p> <p>Владеет и (или) имеет опыт деятельности: навыками работы в компьютерных программах по молекулярному моделированию</p>	в соответствии с учебным планом и планируемые результатами освоения ОПОП
ПК-4 готовность к разработке и реализации методик, технологий и приемов обучения, к анализу результатов процесса их использования в организациях, осуществляющих образовательную деятельность	<p>Умеет: разрабатывать и реализовывать методики обучения химии с использованием информационных технологий</p>	в соответствии с учебным планом и планируемым и результатами освоения ОПОП

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП МАГИСТРАТУРЫ

Дисциплина «Компьютерное моделирование химических процессов» относится к дисциплинам по выбору вариативной части Блока 1 направления подготовки. Изучение данной дисциплины базируется на освоении студентами дисциплин «Информатика», «Теоретические основы неорганической химии», «Органическая химия» направления 04.03.01 Химия.

К началу изучения дисциплины студенты должны владеть:

- знаниями в области теоретических основ неорганической химии, органической химии и информатики;
- умениями работать с научно-технической информацией, систематизировать и обобщать информацию по использованию ресурсов производства;
- навыками и (или) опытом деятельности основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, иметь навыки работы с компьютером как средством управления информацией.

Дисциплина «Компьютерное моделирование химических процессов» является базовой для выполнения научно-исследовательской работы и прохождения Государственной итоговой аттестации.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

очная форма обучения

Вид учебной работы	Объем зачетных единиц / часов по формам обучения
Максимальная учебная нагрузка (всего)	3/108
Контактная работа обучающихся с преподавателем (всего)	24
в том числе:	
Лекции	6
практические занятия	18
Самостоятельная работа студента (всего)	84
в том числе:	
внеаудиторная самостоятельная работа по подготовке к лекционным занятиям	40
внеаудиторная самостоятельная работа при подготовке к семинарским и/или практическим занятиям	20
выполнение заданий для самостоятельной работы в системе управления обучением MOODLE	18
подготовка к зачету	6
Промежуточная аттестация в форме зачета	

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

очная форма обучения

Наименование тем (разделов).	Количество академических или астрономических часов по видам учебных занятий

	Занятия лекционного типа	Занятия практического типа	Другие виды учебных занятий	Самостоятельная работа обучающихся
Тема 1. Введение в хемоинформатику	1			7
Тема 2. Отечественные и зарубежные источники информации по химии	1	3		14
Тема 3. Химические базы данных	1	3		14
Тема 4. Химическая графика	1	3		14
Тема 5. Моделирование в химии	1	6		15
Тема 6. Системы искусственного интеллекта	1	3		14
Зачет				6
ИТОГО	108ч	6	18	84

Тема 1. Введение в хемоинформатику
Новые информационные технологии в науке и образовании. Хемо- и биоинформатика.

Тема 2. Отечественные и зарубежные источники информации по химии
Классификация источников информации по химии. Печатные источники информации. Научные журналы, справочники, монографии. Виды научных публикаций: научная статья, обзор, монография, патент. Реферативные журналы: РЖ «Химия», Chemical Abstracts. Литературная подготовка к синтезу. Справочник Бейльштейна.
Поиск информации в сети Internet. Форматы онлайн-публикаций. Структура сайта издательства. Особенности структуры e-journals. Агрегаторы. Поисковые программы на сайтах издательств.

Тема 3. Химические базы данных
Система управления базами данных химической информации ChemBio Finder пакета ChemOffice. Основные операции с данными. Создание таблиц в режиме конструктора. Задание свойств полей. Ввод данных в режиме таблицы и с использованием форм ввода. Конструирование запросов. Запись условий отбора. Язык SQL. Создание форм и отчетов на основе запросов. Программа для создания базы данных реферируемой литературы Mendeley.

Тема 4. Химическая графика
Программы для визуализации молекул и уравнений химических реакций: ChemDraw пакета ChemOffice и ChemScetch пакета ASDLabs. Основные приемы работы.

Тема 5. Моделирование в химии
Методы математического моделирования в химии. Прогнозирование физико-химических свойств веществ. Общие сведения о программе MathCAD. Интерфейс пользователя. Работа в программе. Программы для предсказания ЯМР спектров органических веществ.
Основы молекулярного моделирования. Представление о квантово-химических методах исследования структуры и свойств молекул с последующей визуализацией результатов, обеспечивающие их трехмерное представление при заданных в расчете условиях. Квантово-химические программы. Пользовательский интерфейс программ Chem3D пакета ChemOffice и HyperChem. Создание и редактирование молекулярной модели. Квантово-химические расчеты.

Тема 6. Системы искусственного интеллекта
Искусственный интеллект в химии. Прогнозирование биологической активности органических веществ. Программа PASSonline. Компьютерный синтез. Искусственные нейронные сети.

5. ПЕРЕЧЕНЬ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Самостоятельная работа по дисциплине имеет своей целью получение необходимых знаний и умений для подготовки к выполнению практических занятий при условии самостоятельной работы с литературой (основной и дополнительной) используя ресурсы НОБИ-центра университета, ЭБС, системы управления обучением MOODLE.

Тематика практических работ, порядок выполнения и контроля самостоятельной работы студентов соответствует приведенному в разделе 4 данного документа.

6. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

6.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы

Реализация дисциплины «Компьютерное моделирование химических процессов» направлена на формирование следующих компетенций:

- способность к самостоятельному освоению и использованию новых методов исследования, к освоению новых сфер профессиональной деятельности (ОК-3);
- способность формировать ресурсно-информационные базы для осуществления практической деятельности в различных сферах (ОК-4);
- способность самостоятельно приобретать и использовать, в том числе с помощью информационных технологий, новые знания и умения, непосредственно не связанные со сферой профессиональной деятельности (ОК-5);
- готовность к разработке и реализации методик, технологий и приемов обучения, к анализу результатов процесса их использования в организациях, осуществляющих образовательную деятельность (ПК-4).

Формирование компетенций ОК-3, ОК-4, ОК-5, ПК-4 происходит в несколько этапов в соответствии с учебным планом и планируемыми результатами освоения ОПОП, соотношенными с планируемыми результатами обучения по каждой дисциплине и практике.

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

Дескриптор компетенций	Показатели оценивания	Критерии оценивания
Компетенция «способность к самостоятельному освоению и использованию новых методов исследования, к освоению новых сфер профессиональной деятельности» (ОК -3).		
Знания	теоретических основ информационных технологий и методов компьютерного моделирования в химии	Отметка «зачтено» выставляется, если студент в целом за семестр набрал от 61 до 100 баллов (с учетом баллов, набранных на промежуточной аттестации (зачете)).
Умения	использования различных методов для компьютерного моделирования и интерпретации полученных результатов	
Навыки и (или) опыт деятельности		
Компетенция «способность формировать ресурсно-информационные базы для осуществления практической деятельности в различных сферах» (ОК – 4).		

Знания	теоретических основ создания баз данных в области химии	Отметка «зачтено» выставляется, если студент в целом за семестр набрал от 61 до 100 баллов (с учетом баллов, набранных на промежуточной аттестации (зачете)).
Умения	планировать и создавать химическую базу данных	
Навыки и (или) опыт деятельности	работы в компьютерных программах по созданию химических баз данных	
Компетенция «способность самостоятельно приобретать и использовать, в том числе с помощью информационных технологий, новые знания и умения, непосредственно не связанные со сферой профессиональной деятельности» (ОК-5).		
Знания	теоретических основ информационных технологий, связанных с профессиональной деятельностью, в том числе молекулярного моделирования	Отметка «зачтено» выставляется, если студент в целом за семестр набрал от 61 до 100 баллов (с учетом баллов, набранных на промежуточной аттестации (зачете)).
Умения	использовать теоретические знания в области информационных технологий для молекулярного моделирования	
Навыки и (или) опыт деятельности	работы в компьютерных программах по молекулярному моделированию	
Компетенция «готовность к разработке и реализации методик, технологий и приемов обучения, к анализу результатов процесса их использования в организациях, осуществляющих образовательную деятельность» (ПК-4)		
Знания		Отметка «зачтено» выставляется, если студент в целом за семестр набрал от 61 до 100 баллов (с учетом баллов, набранных на промежуточной аттестации (зачете)).
Умения	разрабатывать и реализовывать методики обучения химии с использованием информационных технологий	
Навыки и (или) опыт деятельности		

Критерии оценивания компетенций сформированы на основе балльно-рейтинговой системы с помощью комплекса методических материалов, определяющих процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих данный этап формирования компетенций (пункты 6.3, 6.4 данного документа).

Отметка «зачтено» выставляется, если в процессе освоения дисциплины и сдачи зачета сумма баллов БРС находится в диапазоне значений 61–100. При этом студент на зачете дает полный и правильный ответ, изложение материала произведено в логической последовательности, в самостоятельном (без наводящих вопросов) ответе обстоятельно раскрывает теоретические положения дисциплины, приводит аргументированные примеры, раскрывает пути реализации теоретических положений. В ответе могут быть допущены неточности.

Отметка «не зачтено» выставляется, если в процессе освоения дисциплины студент получил 0–40 баллов. При этом студент на зачете показывает незнание или непонимание большей или наиболее значимой части содержания учебного материала по основным и дополнительным вопросам преподавателя, допускаются существенные ошибки, которые студент не может исправить с помощью наводящих вопросов преподавателя, студент допускает грубое нарушение логики изложения.

6.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

1. Список вопросов к зачету:

2. Классификация источников информации по химии. Печатные источники информации. Научные журналы, справочники, монографии. Виды научных публикаций: научная статья, обзор, монография, патент. Реферативные журналы: РЖ «Химия», Chemical Abstracts. Литературная подготовка к синтезу. Справочник Бейльштейна.
3. Поиск информации в сети Internet. Форматы онлайн-публикаций. Структура сайта издательства. Особенности структуры e-journals. Агрегаторы. Поисковые программы на сайтах издательств.
4. Система управления базами данных химической информации ChemBio Finder пакета ChemOffice. Основные операции с данными. Создание таблиц в режиме конструктора. Задание свойств полей. Ввод данных в режиме таблицы и с использованием форм ввода. Конструирование запросов. Запись условий отбора. Язык SQL. Создание форм и отчетов на основе запросов. Программа для создания базы данных реферируемой литературы Mendeley.
5. Программы для визуализации молекул и уравнений химических реакций: ChemDraw пакета ChemOffice и ChemScetch пакета ASDLabs. Основные приемы работы.
6. Методы математического моделирования в химии. Прогнозирование физико-химических свойств веществ. Общие сведения о программе MathCAD. Интерфейс пользователя. Работа в программе. Программы для предсказания ЯМР спектров органических веществ.
7. Основы молекулярного моделирования. Представление о квантово-химических методах исследования структуры и свойств молекул с последующей визуализацией результатов, обеспечивающие их трехмерное представление при заданных в расчете условиях. Квантово-химические программы. Пользовательский интерфейс программ Chem3D пакета ChemOffice и HyperChem. Создание и редактирование молекулярной модели. Квантово-химические расчеты.
8. Искусственный интеллект в химии. Прогнозирование биологической активности органических веществ. Программа PASSonline. Компьютерный синтез. Искусственные нейронные сети.

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

По дисциплине «Компьютерное моделирование химических процессов» используется комплекс учебно-методических материалов в электронном виде, выполняющий обучающую, информационно-справочную и контролирующие функции. В качестве контролирующей функции комплекс используется для текущего и промежуточного контроля успеваемости и полностью обеспечивает возможность самостоятельной работы студента по материалам дисциплины.

Практические занятия, реализуемые в соответствии с тематическим планированием дисциплины (раздел 4), обеспечены методическими рекомендациями, представленными в печатном или электронном виде.

Оценка теоретических знаний, умений и навыков, сформированных в процессе выполнения практических заданий.

Результаты оценивания сформированности знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенции фиксируются в БРС дисциплины, итоговый показатель заносится в зачетно-экзаменационную ведомость дисциплины.

7. ПЕРЕЧЕНЬ ОСНОВНОЙ И ДОПОЛНИТЕЛЬНОЙ УЧЕБНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ, НЕОБХОДИМОЙ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

7.1. Основная литература

1. Богатырева, Ю. И. Информационные и коммуникационные технологии в науке и образовании [Текст] : учебно методическое пособие для магистров, аспирантов, соискателей курсов повышения квалификации / Ю. И. Богатырева ; рец. В. В. Персианов. Тула : Издво ТГПУ им. Л. Н. Толстого, 2010. 122 с.
2. Медведкова, И. Е. Базы данных [Электронный ресурс]: учебное пособие / И.Е. Медведкова, Ю.В. Бугаев. Воронеж : ВГУИТ, 2014. 105 с. ISBN 9785000320600 : Б. ц. URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_view&book_id=336039

7.2. Дополнительная литература

1. Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия [Текст] : учебник для студентов вузов / В. И. Барановский. М. : Академия, 2008. 384 с.
2. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия [Текст] : учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по специальности .ВПО 020101.65"Химия" / А. И. Ермаков. М. : ЮРАЙТ, 2010. 555 с.
3. Интерактивные системы Scilab, Matlab, Mathcad [Электронный ресурс]: учебное пособие / И.Е. Плещинская [и др.]. Казань : Издво КНИТУ, 2014. 195 с. ISBN 9785788217154 : Б. ц. URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_view&book_id=428781
4. Мельников, В. П. Информационные технологии [Текст] : учебник для студентов вузов / В. П. Мельников. М. : Академия, 2008. 432 с.

8. ПЕРЕЧЕНЬ РЕСУРСОВ ИНФОРМАЦИОННО-ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННОЙ СЕТИ «ИНТЕРНЕТ», НЕОБХОДИМЫХ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1. ChemNet Россия [Электронный ресурс] : портал фундаментального химического образования России / МГУ им. М. В. Ломоносова. - М. : [б. и.], 1997. - Загл. с титул. экрана. - Б. ц. URL: <http://www.chem.msu.su>
2. Ximia.org [Электронный ресурс] : информационный портал. - М. : [б. и.], [2000]. - Загл. с титул. экрана. - Б. ц. URL:<http://www.ximia.org>
3. Электронная библиотека "Наука и Техника" [Электронный ресурс] : сайт / МОО "Наука и Техника". - Киев : [б. и.], 1997. - Загл. с титул. экрана. -Б. ц. URL:<http://n-t.ru/>
4. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс] : информационный портал / ООО "РУНЭБ" ; Санкт-Петербургский государственный университет. - М. : [б. и.], 2005. - Загл. с титул. экрана. - Б. ц. URL: www.eLibrary.ru
5. ANCHEM.RU [Электронный ресурс]: российский химико-аналитический портал. - М. : [б. и.], 2002. - Загл. с титул. экрана. - Б. ц. URL: <http://www.anchem.ru/>

9. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Для успешного изучения дисциплины предлагается использовать разработанный комплекс учебно-методических материалов, включающих:

- курс лекций в виде презентаций;
- задания для самостоятельной работы студентов;
- комплекс текущих тестовых заданий и контрольных работ в электронном и печатном виде для контроля знаний по предмету на практических занятиях и КСРС.

Лекции, читаемые преподавателем, являются основным ориентиром при изучении дисциплины. Методической основой освоения курса является рабочая программа по дисциплине, которую следует получить на сайте университета в сети интернет в системе «Электронное обучение» (MOODLE – модульная объектно-ориентированная динамическая учебная среда) и использовать для подготовки к практическим занятиям. Студенту необходимо вести конспекты, в которых необходимо отражать основные понятия, не только на основе лекций, но и на основе работы с основной, дополнительной литературой и интернет-источниками, выполнять задания для самостоятельной работы, предложенные преподавателем.

Готовясь к практическим занятиям, студенту необходимо изучить основную и дополнительную литературу по теме будущего занятия, подготовиться к выполнению практической работы, оформить лабораторный журнал по разработанной схеме, выполнить задания для самостоятельной работы.

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ПРИ ОСУЩЕСТВЛЕНИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ПО ДИСЦИПЛИНЕ, ВКЛЮЧАЯ ПЕРЕЧЕНЬ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ И ИНФОРМАЦИОННЫХ СПРАВОЧНЫХ СИСТЕМ

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине используются информационные технологии, охватывающие ресурсы (компьютеры, программное обеспечение и сети), необходимые для управления информацией (создание, хранение, управление, передача и поиск информации):

- технические средства: компьютерная техника и средства связи (ноутбук, проектор, экран, USB-накопители и т.п.);
- коммуникационные средства (проверка домашних заданий и консультирование посредством электронной почты, личного кабинета студента и преподавателя);
- организационно-методическое обеспечение (электронные учебные и учебно-методические материалы, компьютерное тестирование, использование электронных мультимедийных презентаций при проведении лекционных и практических занятий);
- программное обеспечение (Microsoft Office (Excel, Power Point, Word и т.д.), Skype, поисковые системы, электронная почта и т.п.);
- среда электронного обучения ТГПУ им. Л.Н. Толстого <http://moodle.tspu.ru>.

комплект лицензионного программного обеспечения

1. Операционная система Microsoft Windows XP Professional Russian – Лицензия № 16698685 от 08.08.2003 г.
2. Программное обеспечение Microsoft Office XP Professional Win32 Russian– Лицензия № 16698685 от 08.08.2003 г.
3. Программное обеспечение Microsoft Office Enterprise 2007 Russian - Лицензия №46138962 от 16.11.2009 г.
4. Операционная система Microsoft Windows Professional 7 Russian – Лицензия №48497058 от 13.05.2011 г.
5. Программа для распознавания текста ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition лицензионный сертификат - код позиции AF90-3U1V25-102, ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition Volume License Concurrent от 28 июля 2009 г.
6. Электронный словарь ABBYY Lingvo X3 Европейская версия - Код позиции AL14-2U1V05-102, ABBYY Lingvo x3 Европейская версия. Именная лицензия Concurrent от 28 июля 2009 г.
7. Комплексная Система Антивирусной Защиты Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition. 500-999 Node 2 year Educational Renewal License – Лицензия № 1894-150512-101810 от 12-05-2015 г.

современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. Компьютерная информационно-правовая система «Гарант» - регистрационный номер клиента 71-70685-000033.
2. Официальный интернет-портал правовой информации <http://pravo.gov.ru>.
3. Портал Федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования <http://fgosvo.ru>.
4. Портал "Информационно-коммуникационные технологии в образовании" <http://www.ict.edu.ru>.

11. ОПИСАНИЕ МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ БАЗЫ, НЕОБХОДИМОЙ ДЛЯ ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ПО ДИСЦИПЛИНЕ

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оборудованные мультимедийными средствами обучения.

2. Учебные аудитории для проведения практических занятий.

3. Компьютерные классы с доступом в интернет для работы с информационно-правовыми системами, в том числе «Гарант» и с доступом к электронно-библиотечной системе.

4. Аудитории для самостоятельной работы студентов, оснащенные компьютерной техникой, имеющей доступ к информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», электронной информационно-образовательной среде ТГПУ им. Л.Н. Толстого, внутривузовскому сетевому окружению.

12. АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ.

1. Планируемые результаты обучения при освоении дисциплины, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

В результате освоения дисциплины у студента должны быть сформированы следующие компетенции:

- способностью к самостоятельному освоению и использованию новых методов исследования, к освоению новых сфер профессиональной деятельности (ОК-3);
- способностью формировать ресурсно-информационные базы для осуществления практической деятельности в различных сферах (ОК-4);
- способностью самостоятельно приобретать и использовать, в том числе с помощью информационных технологий, новые знания и умения, непосредственно не связанные со сферой профессиональной деятельности (ОК-5);
- готовность к разработке и реализации методик, технологий и приемов обучения, к анализу результатов процесса их использования в организациях, осуществляющих образовательную деятельность (ПК-4).

В результате освоения дисциплины студент должен приобрести

знания:

теоретических основ информационных технологий и методов компьютерного моделирования в химии (ОК-3);

теоретических основ создания баз данных в области химии (ОК-4);

теоретических основ информационных технологий, связанных с профессиональной деятельностью, в том числе молекулярного моделирования (ОК-5);

умения:

использования различных методов для компьютерного моделирования и интерпретации полученных результатов (ОК-3);

планировать и создавать химическую базу данных (ОК-4);

использовать теоретические знания в области информационных технологий для молекулярного моделирования (ОК-5);

разрабатывать и реализовывать методики обучения химии с использованием информационных технологий (ПК-4);

навыки:

работы в компьютерных программах по созданию химических баз данных (ОК-4);

работы в компьютерных программах по молекулярному моделированию (ОК-5).

2. Место дисциплины в структуре ОПОП.

Дисциплина «Компьютерное моделирование химических процессов» относится к дисциплинам по выбору вариативной части Блока 1 направления подготовки. Изучение данной дисциплины базируется на освоении студентами дисциплин «Информатика», «Теоретические основы неорганической химии», «Органическая химия» направления 04.03.01 Химия.

К началу изучения дисциплины студенты должны владеть:

- знаниями в области теоретических основ неорганической химии, органической химии и информатики;
- умениями работать с научно-технической информацией, систематизировать и обобщать информацию по использованию ресурсов производства;
- навыками и (или) опытом деятельности основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, иметь навыки работы с компьютером как средством управления информацией.

Дисциплина «Компьютерное моделирование химических процессов» является базовой для выполнения научно-исследовательской работы и прохождения Государственной итоговой аттестации.

3. Объем дисциплины 3 зачетные единицы.
4. Образовательный процесс осуществляется на русском языке.
5. Разработчик: Блохин И.В., кандидат химических наук, доцент кафедры химии.

13. ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

2016-2017 учебный год

В рабочую программу дисциплины внесены изменения в части обновления состава необходимого комплекта лицензионного программного обеспечения, современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, к которым обеспечен доступ обучающимся.

Изменения к рабочей программе дисциплины утверждены на заседании Ученого совета университета, протокол № 2 от 16 февраля 2017 г.

2017-2018 учебный год

Обновлен состав необходимого комплекта лицензионного программного обеспечения.

1. Операционная система Microsoft Windows XP Professional Russian – Лицензия № 16698685 от 08.08.2003 г.
2. Операционная система Microsoft Windows Professional 7 Russian – Лицензия №48497058 от 13.05.2011 г., договор № Пр/16/6 от 05 апреля 2016 года.
3. Операционная система Microsoft Windows 10 Professional Russian - контракт № ПР/ФЕН/15/18 от 23.10.2015 г., договор № Пр/16/6 от 05 апреля 2016 года.
4. Программное обеспечение Microsoft Office Enterprise 2007 Russian - Лицензия №46138962 от 16.11.2009 г.
5. Программное обеспечение Microsoft Office 2013 Professional - контракт № 405535 от 2 ноября 2015 года, контракт № ПР/ФЕН/15/18 от 23.10.2015 г.
6. Программа для распознавания текста ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition лицензионный сертификат - код позиции AF90-3U1V25-102, ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition Volume License Concurrent от 28 июля 2009 г.
7. Электронный словарь ABBYY Lingvo X3 Европейская версия - Код позиции AL14-2U1V05-102, ABBYY Lingvo x3 Европейская версия. Именная лицензия Concurrent от 28 июля 2009 г.
8. Комплексная Система Антивирусной Защиты Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition. 500-999 Node 2 year Educational Renewal License – Лицензия № 17E0-170518-102844-823-690 от 18-05-2017 г.

Обновлен состав современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, к которым обеспечен доступ обучающимся.

1. Компьютерная информационно-правовая система «Гарант» - регистрационный номер клиента 71-70685-000033.
2. Официальный интернет-портал базы данных правовой информации <http://pravo.gov.ru>.
3. Портал Федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования <http://fgosvo.ru>.
4. Портал «Информационно-коммуникационные технологии в образовании» <http://www.ict.edu.ru>.
5. Web of Science Core Collection – политематическая реферативно-библиографическая и наукометрическая (библиометрическая) база данных <http://webofscience.com>.
6. Полнотекстовый архив ведущих западных научных журналов на российской платформе Национального электронно-информационного консорциума (НЭИКОН) <http://neicon.ru>.
7. Базы данных издательства Springer <https://link.springer.com>.

Изменения к рабочей программе дисциплины утверждены на заседании Ученого совета университета, протокол № 8 от 31 августа 2017 г.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО

Разработчик:

Фамилия, имя, отчество	Учёная степень	Учёное звание	Должность
Блохин Игорь Васильевич	Кандидат химических наук	Доцент	Доцент кафедры химии