



Факультет	Естественных наук
Кафедра	Химии
Направление подготовки	44.04.01 Педагогическое образование
Направленность (профиль)	Образование в области органической химии
Информационные технологии и моделирование в химии	Б1.В.ДВ.06.01

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 «Информационные технологии и моделирование в ХИМИИ»

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. Шахкельдян

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 способность к самостоятельному освоению и использованию новых методов исследования, к освоению новых сфер профессиональной деятельности	Выпускник знает: теоретические основы информационных технологий и методов компьютерного моделирования в химии Умеет: использовать различные методы для компьютерного моделирования и интерпретации полученных результатов	в соответствии с учебным планом и планируемым и результатами освоения ОПОП
ОК-4 способность формировать ресурсно-информационные базы для осуществления практической деятельности в различных сферах	Выпускник знает: теоретические основы создания баз данных в области химии Умеет: планировать и создавать химическую базу данных Владеет и (или) имеет опыт деятельности: навыками работы в компьютерных программах по созданию химических баз данных	в соответствии с учебным планом и планируемым и 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	Выпускник знает: теоретические основы информационных технологий, связанные с профессиональной деятельностью, в том числе молекулярного моделирования Умеет: использовать теоретические знания в области информационных технологий для молекулярного моделирования Владеет и (или) имеет опыт деятельности: навыками работы в компьютерных программах по молекулярному моделированию	в соответствии с учебным планом и планируемым и 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	Умеет: разрабатывать и реализовывать методики обучения химии с использованием информационных технологий	в соответствии с учебным планом и планируемым и результатами освоения ОПОП

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП МАГИСТРАТУРЫ

Дисциплина «Информационные технологии и моделирование в химии» 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 «Информационные технологии и моделирование в химии» является базовой для выполнения научно-исследовательской работы и 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

Информационные технологии и моделирование в химии		Б1.В.ДВ.06.01		
	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 «Информационные технологии и моделирование в химии» 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).		

Информационные технологии и моделирование в химии		Б1.В.ДВ.06.01
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

Список вопросов к зачету:

1. 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.
2. Поиск информации в сети Internet. Форматы онлайн-публикаций. Структура сайта издательства. Особенности структуры e-journals. Агрегаторы. Поисковые программы на сайтах издательств.
3. 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.
4. Программы для визуализации молекул и уравнений химических реакций: ChemDraw пакета ChemOffice и ChemScetch пакета ASDLabs. Основные приемы работы.
5. 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.
6. 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.
7. 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 «Информационные технологии и моделирование в химии» используется комплекс учебно-методических материалов в электронном виде, выполняющий обучающую, информационно-справочную и контролируемую 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 «Информационные технологии и моделирование в химии» 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 «Информационные технологии и моделирование в химии» 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