

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ**  
**ДВНЗ «ПРИКАРПАТСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**  
**ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТЕФАНІКА»**

Факультет природничих наук

Кафедра хімії

**СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

**Комп'ютерні технології в хімії**

Освітня програма Хімія

Спеціальність 102 Хімія

Галузь знань 10 Природничі науки

Затверджено на засіданні кафедри  
Протокол № 1 від “28” серпня 2019 р.

м. Івано-Франківськ - 2019

## ЗМІСТ

1. Загальна інформація
2. Анотація до курсу
3. Мета та цілі курсу
4. Компетентності
5. Результати навчання
6. Організація навчання курсу
7. Система оцінювання курсу
8. Політика курсу
9. Рекомендована література

<b>1. Загальна інформація</b>	
<b>Назва дисципліни</b>	Комп'ютерні технології в хімії
<b>Рівень вищої освіти</b>	перший (бакалаврський) рівень
<b>Викладач (-і)</b>	к.т.н., доцент Микитин Ігор Михайлович
<b>Контактний телефон викладача</b>	+380663609405
<b>Е-mail викладача</b>	<a href="mailto:mibius@i.ua">mibius@i.ua</a>
<b>Формат дисципліни</b>	семестровий
<b>Обсяг дисципліни</b>	3 кредити, 90 годин
<b>Посилання на сайт дистанційного навчання</b>	<a href="https://d-learn.pnu.edu.ua/">https://d-learn.pnu.edu.ua/</a>
<b>Консультації</b>	
<b>2. Анотація до курсу</b>	
<p>Упровадження нових інформаційних технологій в освітній процес, підвищення рівня комп'ютерної (інформаційної) підготовки учасників освітнього процесу є для студентів важливим. Дисципліна «Комп'ютерні технології в хімії» забезпечує формування у студентів цифрової професійно-орієнтованої компетентності та спрямована на вивчення системного та типового програмного забезпечення персональних комп'ютерів і вдосконалення навиків роботи з оригінальними програмами, що використовуються для обробки текстової та графічної інформації для забезпечення фахового рівня виконання робіт по представленню результатів науково-дослідної роботи.</p>	
<b>3. Мета та цілі курсу</b>	
<p><b>Мета</b> вивчення дисципліни «Комп'ютерні технології» – отримання студентом умінь і навичок ефективного використання сучасних комп'ютерно-інформаційних технологій у своїй діяльності, практичної підготовки по користуванню програмами обробки текстової та графічної інформації для забезпечення фахового рівня виконання робіт по представленню результатів науково-дослідної роботи.</p> <p>У результаті вивчення дисципліни «Комп'ютерні технології в хімії» студенти повинні сформувати базу знань, умінь і навичок, необхідних для кваліфікованого та ефективного використання сучасних інформаційно-комунікаційних технологій.</p> <p>Студенти повинні <b>знати</b>: характеристику будови комп'ютера з огляду на його швидкодію; принципи роботи програм обробки текстової та графічної інформації; про інформаційні ресурси суспільства, про сучасні інформаційні системи в професійній сфері; <b>вміти</b> покращити роботу комп'ютера, працювати з інформаційними ресурсами в мережі Інтернет; представити графічні дані по науковій роботі у необхідному вигляді, провести комп'ютерну обробку результатів досліджень, правильно навести опис наукової інформації у необхідному вигляді.</p>	
<b>4. Компетентності</b>	
<p><b>Загальні компетентності (ЗК):</b></p> <p>ЗК 1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.</p> <p>ЗК 2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.</p> <p>ЗК 3. Здатність працювати у команді.</p> <p>ЗК 4. Здатність до адаптації та дії в новій ситуації.</p> <p>ЗК 5. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій.</p> <p>ЗК 10. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.</p> <p><b>Фахові компетентності (СК):</b></p> <p>СК 1. Здатність застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії.</p> <p>СК 2. Здатність розпізнавати і аналізувати проблеми, застосовувати обґрунтовані методи вирішення проблем, приймати обґрунтовані рішення в області хімії.</p> <p>СК 4. Здатність до використання спеціального програмного забезпечення та моделювання в хімії.</p> <p>СК 5. Здатність здійснювати сучасні методи аналізу даних.</p>	

### 5. Результати навчання

- ПРН02. Розуміти основи математики на рівні, достатньому для досягнення інших результатів навчання, передбачених цим стандартом та освітньою програмою.
- ПРН03. Описувати хімічні дані у символному вигляді.
- ПРН15. Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.
- ПРН16. Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.
- ПРН17. Працювати самостійно або в групі, отримати результат у межах обмеженого часу з наголосом на професійну сумлінність та наукову добросовісність.
- ПРН21. Здійснювати моніторинг та аналіз наукових джерел інформації та з фахової літератури.
- ПРН23. Грамотно представляти результати своїх досліджень у письмовому вигляді державною та іноземною мовами з урахуванням мети спілкування.
- ПРН24. Використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації даних.

### 6. Організація навчання курсу

#### Обсяг курсу

Вид заняття	Загальна кількість годин
лекції	10
семінарські заняття / практичні / лабораторні	20
самостійна робота	60

#### Ознаки курсу

Семестр	Спеціальність	Курс (рік навчання)	Нормативний / вибірковий
<b>Другий</b>	<b>102 Хімія</b>	Перший	Нормативний

#### Тематика курсу

Тема, план	Форма заняття	Література	Завдання, год.	Вага оцінки	Термін виконання
Змістовий модуль 1. Тема 1. Будова комп'ютера	Лекція	[ 1-4 ]	1 год. Самостійна робота: 2 год.		Згідно розкладу
Тема 2. Основи роботи в операційній системі WINDOWS	Лекція	[ 1-4 ]	1 год. Самостійна робота: 2 год.		Згідно розкладу
Тема 3. Табличний процесор (Excel).	Лекція	[ 1-4 ]	1 год. Самостійна робота: 2 год.		Згідно розкладу
Тема 4. Обчислення коефіцієнта детермінації.	Лекція	[ 1-4 ]	1 год. Самостійна робота: 2 год.		Згідно розкладу
Тема 5. Метод апроксимації в Microsoft Excel.	Лекція	[ 1-4 ]	1 год. Самостійна робота: 2 год.		Згідно розкладу

Тема 6. Побудова лінії тренду в Microsoft Excel	Лекція	[ 1-4 ]	1 год. Самостійна робота: 2 год.		Згідно розкладу
Тема 7. Пошук і аналіз наукової бібліографічної інформації	Лекція	[ 1-4 ]	1 год. Самостійна робота: 2 год.		Згідно розкладу
Тема 8. ChemDraw	Лекція	[ 1-4 ]	2 год. Самостійна робота: 4 год.		Згідно розкладу
Тема 9. Origin	Лекція	[ 1-4 ]	1 год. Самостійна робота: 2 год.		Згідно розкладу
Змістовий модуль 2. Тема 1. Робота в Paint	Лабораторне заняття	[ 5-7 ]	2 год. Самостійна робота: 4 год.	11,1	Згідно розкладу
Тема 2. Текстовий процесор	Лабораторне заняття	[ 5-7 ]	2 год. Самостійна робота: 4 год.	11,1	Згідно розкладу
Тема 3. Створення та редагування таблиць засобами текстового редактору	Лабораторне заняття	[ 5-7 ]	2 год. Самостійна робота: 4 год.	11,1	Згідно розкладу
Тема 4. Введення, редагування і форматування формул у текстовому редакторі	Лабораторне заняття	[ 5-7 ]	2 год. Самостійна робота: 4 год.	11,1	Згідно розкладу
Тема 5. Робота з графічними об'єктами у текстовому редакторі	Лабораторне заняття	[ 5-7 ]	2 год. Самостійна робота: 4 год.	11,1	Згідно розкладу
Тема 6. Введення та форматування даних у табличному редакторі	Лабораторне заняття	[ 5-7 ]	2 год. Самостійна робота: 4 год.	11,1	Згідно розкладу
Тема 7.	Лабораторне	[ 5-7 ]	2 год.	11,1	Згідно

Графічне представлення даних засобами табличного процесору	заняття		Самостійна робота: 4 год.		розкладу
Тема 8. Робота з формулами табличному процесорі	Лабораторне заняття	[ 5-7 ]	4 год. Самостійна робота: 8 год.	11,1	Згідно розкладу
Тема 9. Зображення хімічних структур реакцій за допомогою програми ChemDraw	Лабораторне заняття	[ 5-7 ]	2 год. Самостійна робота: 4 год.	11,1	Згідно розкладу

#### 7. Система оцінювання курсу

Загальна система оцінювання курсу	Система оцінювання курсу відбувається згідно з критеріями оцінювання навчальних досягнень студентів, що регламентовані в університеті: "відмінно" – студент демонструє повні і глибокі знання навчального матеріалу, достовірний рівень розвитку умінь та навичок, правильне й обґрунтоване формулювання практичних висновків, вміння приймати необхідні рішення в нестандартних ситуаціях, вільне володіння науковими термінами, аналізує причино – наслідкові зв'язки; "добре" – студент демонструє повні знання навчального матеріалу, але допускає незначні пропуски фактичного матеріалу, вміє застосовувати його щодо конкретно поставлених завдань, у деяких випадках нечітко формулює загалом правильні відповіді, допускає окремі несуттєві помилки та неточності; "задовільно" – студент володіє більшою частиною фактичного матеріалу, але викладає його не досить послідовно і логічно, допускає істотні пропуски у відповіді, не завжди вміє інтегровано застосувати набуті знання для аналізу конкретних ситуацій, нечітко, а інколи й невірно формулює основні теоретичні положення та причинно-наслідкові зв'язки; "незадовільно" – студент не володіє достатнім рівнем необхідних знань, умінь, навичок, науковими термінами.
Вимоги до письмової роботи	-
Семінарські заняття	-
Умови допуску до підсумкового контролю	Необхідність виконання та захисту більше 50% лабораторних робіт.

#### 8. Політика курсу

Студенти повинні дотримуватися правил внутрішнього розпорядку Університету, усіх принципів та положень нормативних документів щодо організації навчального процесу у ЗВО.

Загальна максимальна сума балів, яка присвоюється студентові за семестр, становить 100 балів, яка є сумою балів за роботу на практичних заняттях. Лабораторна робота з незадовільним результатом не зараховується і повинна бути переробленою. На захист роботи виносяться теоретичні основи роботи та методика її виконання; захист може проводитися у вигляді стандартизованого тестування. Критерії оцінювання захисту роботи такі: захист вважається відмінним при безпомилковому знанні теоретичних основ і методики виконання роботи, добрим – при допущенні несуттєвих помилок або неточностей, задовільним – при допущенні окремих значних помилок, незадовільним – при відсутності розуміння теоретичних основ та методики роботи.

*Політика щодо дедлайнів та перескладання:* Студент, який не виконав 50% лабораторних робіт до початку екзаменаційної сесії може отримати допуск на складання іспиту шляхом перескладання пропущених робіт, виконання індивідуальних завдань.

*Політика щодо академічної доброчесності:* Списування під час виконання завдань заборонені (в т.ч. із використанням мобільних девайсів).

*Політика щодо відвідування:* Відвідування лабораторних занять, відпрацювання пропущених лабораторних занять в назначений викладачем час, допуск до лабораторних занять є обов'язковим. За об'єктивних причин (наприклад, хвороба, міжнародне стажування, тощо) навчання може відбуватись в он-лайн формі за погодженням із викладачем.

### **9. Рекомендована література**

1. Bienz S. Short Manual to the Chemical Drawing Program ChemDraw. University of Zurich, 2013. 22 p.
2. CS ChemDraw 17.0 for Windows and Macintosh User's Guide. CambridgeSoft Corporation, 2017. 378 p.
3. Origin User Guide. OriginLab Corporation, 2017. 286 p.
4. Kenny B. Lipkowitz, Thomas R. Cundari, Valerie J. Gillet Reviews in Computational Chemistry. Volume 6. Wiley-VCH, 2001. 480 p.
5. Білий О.В., Біла Н.І. Створення та редагування хімічної графіки в програмі ChemDraw. Учебно-методичний посібник. Донецьк: ДонНУ, 2003. 45 с.
6. Бондар О.С. Практикум з комп'ютерної хімії. Навчальний посібник / О.С. Бондар. Чернігів: ЧНПУ, 2017. 68 с.
7. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. Навчальний посібник / М.А. Туровський, О. М. Туровська. Донецьк: ДонНУ, 2004. 131 с.

**Викладач** \_\_\_\_\_

**Микитин І. М.**