

Донбаська державна машинобудівна академія (ДДМА)

Кафедра хімії та охорони праці



Затверджую.

Декан факультету ФІТО

Гринь О.Г./

« 1 » вересня 2022 р.

Гарант освітньої програми:

«Хімія харчових продуктів»

\_\_\_\_\_ / Турчанін М. /

« 1 » вересня 2022 р.

Розглянуто і схвалено  
на засіданні кафедри Хімії та ОП  
Протокол № 1 від 30.08.2022 р.  
Завідувач кафедри

\_\_\_\_\_ / Авдеєнко А. /

## РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

### «Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії»

Галузь знань	10 «Природничі науки»
Спеціальність	102 «Хімія»
Освітньо-професійна програма	«Хімія харчових продуктів»
Освітній рівень	Бакалавр
Факультет	Факультет інтегрованих технологій і обладнання (ФІТО)
Розробник: доцент, к.х.н. Коновалова Світлана	

2022-2023 навчальний рік

## 1. ОПИС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Показники		Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни	
денна на базі ПЗСО	денна на базі ОКР «Молодший бакалавр»		денна на базі ПЗСО	денна на базі ОКР «Молодший бакалавр»
Кількість кредитів		Освітньо-професійна програма: <b>«Хімія харчових продуктів»</b>	Вибіркова	
3	3			
Загальна кількість годин				
90	90	Професійна кваліфікація:	Рік підготовки	
Модулів – 1			2-й	1-й
Змістових модулів – 2			Семестр	
Індивідуальне науково-дослідне завдання			3-й	1-й
_____ (назва)			Лекції	
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 2/2 самостійної роботи студента – 4/4			–	
		–		
		Практичні/Лабораторні		
		30 год.	30 год.	
		Самостійна робота		
		60 год.	60 год.	
		Вид контролю		
		<b>залік</b>	<b>залік</b>	

### Примітка.

Співвідношення кількості годин аудиторних занять до самостійної і індивідуальної роботи для денної форми навчання становить 30/60 (30/60 прискор).

## 2. ЗАГАЛЬНІ ВІДОМОСТІ, МЕТА ТА ЗАВДАННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Хімія призводить до утворення значної кількості даних, яка зростає лавино подібно. Комбінаторна хімія і скрінінг генерують величезні кількості нових даних, які можна раціонально використовувати лише за умови їх зберігання у вигляді спеціалізованих баз даних. З іншого боку, для вирішення багатьох хімічних задач необхідна інформація відсутня. Інформація про 3D-будову, отримана методом рентгеноструктурного аналізу, на даний час відома лише для 300000 органічних сполук, а найбільша база даних ІЧ-спектрів містить інформацію про 200000 сполук. Ця кількість інформації здається надзвичайно великою, але це всього лише мала доля від кількості відомих на сьогодні сполук. Тому постає питання прогнозування необхідної інформації для нових сполук на базі вже відомих даних.

Усі ці хімічні задачі вимагають нових підходів до їх вирішення, і саме в цій сфері потрібні методи хімічної інформатики, які успішно використовуються у різних областях хімічної науки: фізичній, аналітичній, органічній хімії, біохімії, матеріалознавстві, хімії полімерів тощо.

**Метою** викладання дисципліни «Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії» є набуття теоретичних основ і практичних навичок роботи з комп'ютером, спеціалізованими інформаційними базами даних, використання сучасного програмного забезпечення для автоматизації професійної діяльності, вивчення основних принципів представлення хімічної інформації, нових підходів і напрямів розвитку хімічної інформатики, опанування методами представлення хімічних структур, пошуку хімічної інформації.

Особливістю викладання даної дисципліни є поєднання лекційного матеріалу з лабораторними роботами.

Завдання викладання дисципліни - дати студентам знання, сформувані вміння та навички, які перелічено нижче.

В результаті вивчення дисципліни студенти повинні

**знати:**

- основні принципи будови хімічних сполук у хімічних редакторах;
- основні принципи відображення хімічних реакцій у хімічних редакторах;
- основні типи спеціалізованих хімічних редакторів;
- основні принципи представлення спеціалізованої хімічної інформації у мережі Інтернет;
- основні принципи представлення бібліографічної інформації у мережі Інтернет;

**вміти:**

- здійснювати моніторинг та аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури;
- використовувати отримані знання, розуміння і компетенції на практиці для вирішення задач та проблем відомої природи;
- виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів;

– використовувати спеціальне програмне забезпечення, а також інформаційні технології для рішення експериментальних і практичних завдань у галузі професійної діяльності;

**опанувати навичками:**

– використання інформаційних і комунікаційних технологій;  
– вчитися і самостійно оволодівати сучасними знаннями у галузі інформаційних і комунікаційних технологій;  
– будови хімічних сполук у хімічних редакторах;  
– відображення хімічних реакцій у хімічних редакторах;  
– пошуку необхідної спеціальної інформації у мережі Інтернет;  
– роботи з довідковими даними й іншою спеціальною літературою;  
– формулювання загальних і часткових висновків за результатами діяльності.

Завдання викладання дисципліни – надати студентам наступні програмні компетентності і програмні результати навчання.

**Загальні компетентності:**

– здатність до абстрактного мислення, критичного аналізу, оцінці та синтезу нових та складних ідей;  
– здатність вільно спілкуватися іноземною мовою;  
– здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями;  
– навички використання інформаційних і комунікаційних технологій;  
– здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

**Фахові компетентності:**

– здатність застосовувати знання і розуміння математики, фізики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії;  
– здатність до використання спеціального програмного забезпечення та моделювання в хімії, а також інформаційних технологій для рішення експериментальних і практичних завдань у галузі професійної діяльності;  
– здатність використовувати сучасні методи аналізу даних;  
– здатність здійснювати кількісні вимірювання фізико-хімічних величин, описувати, аналізувати і критично оцінювати експериментальні дані;  
– здатність використовувати стандартне хімічне обладнання, володіння навичками, що необхідні для проведення експерименту з використанням спеціального лабораторного обладнання та приладів в аналітичній та синтетичній роботі;  
– вміння спілкування в діалоговому режимі з широкою професійною спільнотою та громадськістю в галузі професійної діяльності.

**Програмні результати навчання.**

– розуміти основи математики на рівні, достатньому для досягнення інших результатів навчання, передбачених цим стандартом та освітньою програмою;  
– описувати хімічні дані у символічному вигляді;  
– спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних;

- виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів;
- здійснювати моніторинг та аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури;
- використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації даних.

### 3. ПРОГРАМА ТА СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Денна форма навчання на базі ПЗСО та прискорена форма навчання на основі диплому молодшого спеціаліста

Вид навчальних занять або контролю	Розподіл між учбовими тижнями															Вид підсумкового контролю
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	
Лекції																
Практ. зан.																
Лабор. Зан.	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	<b>30</b>
Сам. робота	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	<b>60</b>
КСР		КСР		КСР		КСР		КСР		КСР		КСР		КСР		
Розрахунок за роботу																
Контрольні роботи	ВК															КР
Модулі	●							М1								●

Примітка. ВК – вхідний контроль; КР – контрольна робота; КСР – консультація;

### 4. ЛАБОРАТОРНІ РОБОТИ

Особливістю викладання даної дисципліни є поєднання лекційного матеріалу з лабораторними роботами. На кожному занятті наданий теоретичний матеріал одразу розглядається на практиці з використанням відповідного програмного забезпечення або відповідних інформаційних ресурсів.

**Метою** циклу лабораторних робіт є опанувати навичками:

- використання інформаційних і комунікаційних технологій;
- вчитися і самостійно оволодівати сучасними знаннями у галузі інформаційних і комунікаційних технологій;
- будови хімічних сполук у хімічних редакторах;
- відображення хімічних реакцій у хімічних редакторах;
- пошуку необхідної спеціальної інформації у мережі Інтернет.
- роботи з довідковими даними й іншою спеціальною літературою;
- формулювання загальних і часткових висновків за результатами діяльності.

Лабораторні роботи виконуються з використанням методичних вказівок [2].

Кожна лабораторна робота містить завдання для самостійного виконання студентом. Всі лабораторні роботи оформлюються студентами у вигляді звітів.

## МОДУЛЬ 1

### Змістовний модуль 1. Комп'ютерні технології в хімії

#### Тема 1.1. Мета і завдання курсу. Спеціальні програми для візуалізації хімічних структур.

Вступ: мета і завдання курсу. Ліцензії на програмне забезпечення. Огляд програмного забезпечення для створення хімічних формул. Класифікація спеціальних хімічних програм, що використовуються для візуалізації хімічних формул, створення 2D та 3D моделей молекул, їх призначення та можливості.

Література: [1, розділ 1.1].

*Завдання на СРС: Огляд безкоштовного програмного забезпечення для створення хімічних формул [1].*

#### Тема 1.2. Створення хімічних формул за допомогою спеціального програмного забезпечення.

Графічні редактори хімічних формул MarvinSketch, ChemDraw та ChemSketch: особливості інтерфейсу та структура меню програми. Використання заготовок та шаблонів для створення функціональних груп, елементів хімічних формул. Зображення молекул неорганічних і органічних речовин. 1-D рівень представлення хімічних структур. Кодування SMILES, основні принципи побудови, переваги та недоліки застосування.

Представлення і візуалізація хімічних структур на 2D рівні.

Література: [1, розділ 1.2].

*Завдання на СРС: Використання автоматичної перевірки та аналізу будови хімічної структури. [1].*

Генерація систематичної назви, кодів SMILES і InChI, розрахункових значень фізико-хімічних параметрів в програмах MarvinSketch, ChemDraw та ChemSketch.

3D рівень представлення хімічної структури. Принципи побудови 3D-моделей. 3D хімічна графіка в програмі 3D Viewer комплексу ACD/Labs. Основні принципи роботи. Стили представлення молекулярних структур. Різні формати завдання параметрів молекули: Z-матриця, внутрішні координати. Вимірювання параметрів молекули, створення анімаційних презентацій.

Література: [1, розділ 1.2].

*Завдання на СРС: Принципи будови Z-матриці [1].*

#### Тема 1.3. Інтеграція даних спеціалізованих програм до програм пакету MS Office.

Інтеграція результатів, отриманих в редакторах MarvinSketch, ChemDraw, ChemSketch та програмі 3D Viewer, до програм пакету MS Office – Word, Excel,

Power Point. Методи вставки даних – як об’єкт, як рисунок. Можливість подальшого редагування об’єкту. Вбудовування даних файлів формату \*.cdx.

Література: [1, розділ 1.3].

*Завдання на СРС: Інтеграція даних спеціалізованих програм до програми Access пакету MS Office [1].*

## **Змістовний модуль 2. Інформаційні технології в хімії**

### **Тема 2.1. Хімічні каталоги та бази даних в мережі Internet.**

Ідентифікатор речовин – CAS registry number (CAS #). Пошук даних у хімічних каталогах та базах даних за ідентифікаторами речовин: CAS registry number (CAS #), SMILES, InChI, InChIKey. Хімічні каталоги: Merck, e-Molecules. Бази даних: PubChem, ChemSpider, COMMON CHEMISTRY (CAS), Organic Syntheses.

Література: [1, розділ 2.1].

*Завдання на СРС: Пошук даних у базі даних e-Molecules [1].*

### **Тема 2.2. Електронні ресурси хімічної наукової періодики та патентної інформації**

Наукова періодика України – Національна бібліотека України ім. В. І. Вернадського. Пошук публікацій у фахових виданнях України.

Наукова періодика світу.

Патентні бази даних.

Системи ідентифікації науковців і оцінювання наукової діяльності. Міжнародний реєстр вчених ORCID.

Наукометричні реферативні бази даних Web of Science Core Collection (WoS CC), Scopus. Основи роботи в міжнародній науковій базі Scopus.

Література: [1, розділ 2.2].

*Завдання на СРС: Основи роботи в наукометричній реферативній базі даних Web of Science Core Collection [1].*

### **Тема 2.3. Пошук інформації з хімії у мережі Internet.**

Основні онлайн ресурси хімічної інформації. Спеціалізовані хімічні пошукові системи. Загальні пошукові системи. Алгоритми пошуку необхідної бібліографічної інформації. Алгоритми пошуку даних авторів-науковців. Алгоритми пошуку необхідної інформації за певною темою.

Література: [1, розділ 2.2].

*Завдання на СРС: Основи роботи в наукометричній реферативній базі даних Web of Science Core Collection [1].*

## Перелік лабораторних робіт

№ з/п	Назва теми	Кількість годин	
		Повна форма	Прискор. форма
<b>МОДУЛЬ 1</b>			
1	Побудова структурних формул хімічних сполук засобами графічних редакторів хімічних формул	4	4
2	Використання можливостей графічних хімічних редакторів для створення лінійних кодів, назв та розрахунку властивостей хімічних сполук	4	4
3	3-D Візуалізація хімічних структур	4	4
4	Інтеграція даних спеціалізованих програм до програм пакету MS Office	4	4
5	Пошук даних у хімічних базах даних і каталогах	4	4
6	Пошук інформації у наукометричних та патентних базах даних	4	4
7	Комплексний пошук інформації з хімії у мережі Internet	6	6
	<b>Разом</b>	<b>30</b>	<b>30</b>

## 6. КОНТРОЛЬНІ ЗАХОДИ

Передбачається використання модульно-рейтингової системи оцінювання знань. Основною формою контролю знань студентів в кредитно модульній системі є складання студентами контрольних точок запланованого модулю. Формою контролю є накопичувальна система. Складання модуля передбачає виконання студентом комплексу заходів, запланованих кафедрою і передбачених семестровим графіком навчального процесу та контролю знань студентів, затверджених деканом факультету.

Підсумкова оцінка за модуль виставляється за 100-бальною шкалою. При умові, що студент успішно здає всі контрольні точки, набравши з кожної з них не менше мінімальної кількості балів, необхідної для зарахування відповідної контрольної точки, має за результатами роботи в семестрі підсумковий рейтинг не менше 55 балів, то за бажанням студента в залежності від суми набраних балів йому виставляється підсумкова залікова оцінка за національною шкалою і шкалою ECTS. Переведення набраних студентом балів за 100-бальною шкалою в оцінки за національною (5-бальною) шкалою та шкалою ECTS здійснюється в відповідності до таблиці:

Контроль знань студентів передбачає проведення вхідного, поточного і підсумкового контролю.



Вхідний контроль знань проводиться на першому тижні триместру, в якому вивчається навчальна дисципліна, і включає контроль залишкових знань з окремих навчальних дисциплін, які передують вивченню дисципліни «Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії» і є базовими для її засвоєння, зокрема, неорганічна хімія, математика, інформатика.

Поточний контроль знань студентів включає письмові опитування під час проведення лабораторних робіт, оцінювання звітів з лабораторних робіт і контрольну роботу, яка проводиться на останньому тижні семестру.

Підсумковий контроль знань включає визначення рейтингу за підсумками роботи студента в семестрі.

Залік проводиться після завершення вивчення дисципліни з метою визначення остаточного рейтингу з навчальної дисципліни.

## 7. САМОСТІЙНА РОБОТА

Для покращення засвоєння матеріалу студентами їм рекомендується поглиблене самостійне вивчення окремих питань. Успіх вивчення дисципліни залежить від систематичної самостійної роботи студента з матеріалами лекцій і рекомендованою літературою. Кожна лабораторна робота містить окреме завдання для самостійного виконання студентом.

Під час самостійної роботи студенти вивчають як матеріал аудиторних занять курсу, так і питання винесені на самостійне вивчення.

Самостійна робота планується на кожну годину аудиторного часу і на питання винесені на самостійне вивчення.

Розподіл часу самостійної роботи виконується згідно плану навчального процесу та робочого плану дисципліни.

Під час самостійної роботи студенти звертаються до літератури теоретичного курсу та допоміжної методичної літератури в разі необхідності.

## 8. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1 Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії: стислий конспект лекцій для студентів спеціальності 102 «Хімія» денної форми навчання / уклад. С. О. Коновалова. – Краматорськ : ДДМА, 2020. – 80 с.

2 Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії: методичні вказівки до лабораторних робіт та самостійної роботи для студентів спеціальності 102 «Хімія» денної форми навчання / уклад. С. О. Коновалова. – Краматорськ : ДДМА, 2020. – 80 с.

3 ACD/ChemSketch. Version 2012 for Microsoft Windows. Drawing Chemical Structures and Graphical Images Tutorial. / Advanced Chemistry Development, Inc. 2013. – 156 p.

4 Bienz S. Short Manual to the Chemical Drawing Program ChemDraw / S. Bienz. University of Zurich. 2013. – 22 p.

5 MarvinSketch User's Guide. Available at: <https://docs.chemaxon.com/display/docs/MarvinSketch+User%27s+Guide>

6 Ракша О. В. Інформаційні технології у фізичній хімії: навчально-методичний посібник / О. В. Ракша. – Донецьк: ДонНУ, 2013. – 98 с.

7 Конспект лекцій (опорний) з дисципліни “Комп’ютерна хімія” / уклад.: М. Л. Кулігін. – Херсон: ХНТУ, 2013 – 80 с.

8 Винник О.Ф. Застосування програмного засобу ACD/ChemSketch (Freeware) 12.0 для написання хімічних формул та моделювання хімічних процесів. Навчальний посібник. / О.Ф. Винник, О.М. Свєчнікова, Т.Я. Грановська. – Харків, 2018. – 92с.

9 Фокін А. Г., Васильєва Л. В., Первухін В. М. Методичні вказівки до лабораторних робіт з дисципліни "Інформатика". "Основи роботи в мережі Internet".- Краматорськ : ДДМА, 2007. - 48 с.

10 Гужва В. М. Інформаційні системи і технології на підприємствах : навч. посібник.- К: КНЕУ, 2001. - 400 с.

11 Інформатика. Комп’ютерна техніка. Комп’ютерні технології : підручник / за ред. О. Пушкаря. - К: Академія, 2003. - 704 с.

## 9. ІНФОРМАЦІЙНІ ТА ЕЛЕКТРОННІ РЕСУРСИ З ДИСЦИПЛІНИ

1. <http://www.cambridgesoft.com/> – пакет програмного забезпечення ChemOffice, зокрема, графічний редактор хімічних формул ChemDraw.

2. <http://www.acdlabs.com> – ACD/ChemSketch *Freeware for personal or academic use*, пакет програмного забезпечення для малювання хімічних структур.

3. <http://www.chemaxon.com> – MarvinSketch, редактор хімічних формул.

4. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov> – PubChem, відкрита база даних хімії Національного інституту охорони здоров'я (NIH).

5. <http://www.chemspider.com> – ChemSpider, безкоштовна база даних хімічних структур.

6. <http://www.orgsyn.org/> – Organic Syntheses, база методик синтезу.

7. <https://www.emolecules.com/> – e-Molecules, онлайнвий ресурс пошуку інформації у власній базі даних ресурсу та провідних хімічних каталогах і базах даних властивостей хімічних сполук.

8. <http://www.commonchemistry.org/> – база даних COMMON CHEMISTRY.

9. <http://nfv.ukrintei.ua/> – Реєстр наукових фахових видань України.

10. <https://scholar.google.com/> – Google Scholar

11. <https://elibrary.ru/defaultx.asp> – eLIBRARY, наукова електронна бібліотека.

12. <https://www.elsevier.com/solutions/scopus> – Scopus, одна з найбільших уніфікованих реферативних баз даних рецензованої науково-дослідної літератури.

13. <https://clarivate.com/webofsciencegroup/solutions/web-of-science/> – Web of Science, база даних Інституту наукової інформації.

Розробник:

доцент кафедри хімії  
та охорони праці, к.х.н.

10



Коновалова Світлана Олексіївна