



Донбаська державна машинобудівна академія

Силабус навчальної дисципліни

«Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії»

на 2022 / 2023 навчальний рік

Галузь знань	10 «Природничі науки»
Спеціальність	102 «Хімія»
ОПП (ОНП)	«Хімія харчових продуктів»
Рівень вищої освіти	Бакалавр
Форма навчання	денна
Семестр, в якому викладається дисципліна	3 (навчання на базі ПЗСО) 1 (навчання на основі диплому молодшого спеціаліста)
Статус дисципліни	обов'язкова
Обсяг дисципліни	90 годин (3 кредити ЕКТС)
Мова викладання	українська
Оригінальність навчальної дисципліни	Авторський курс
Факультет	Факультет інтегрованих технологій і обладнання (ФІТО)
Кафедра	Кафедра хімії та охорони праці
Розробник	Доцент, к.х.н. Коновалова Світлана Олексіївна
Викладач, який забезпечує проведення лекційних занять	Доцент, к.х.н. Коновалова Світлана Олексіївна
Викладач, який забезпечує проведення лабораторних занять	Доцент, к.х.н. Коновалова Світлана Олексіївна
Локація та матеріально-технічне забезпечення	Інформаційно-обчислювальний центр
Лінк на дисципліну	http://www.dgma.donetsk.ua/obschaya-informatsiya-hiop.html http://moodle.dgma.donetsk.ua/course/view.php?id=1412

Кількість годин	Лекції	Практичні заняття	Лабораторні заняття	Самостійна робота	Вид підсумкового контролю
90			30	60	Залік

Що буде вивчатися (предмет навчання)	Предметом навчання дисципліни Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії є спеціалізоване сучасне програмне забезпечення, спеціалізовані інформаційні бази даних
Чому це цікаво/потрібно вивчати (мета)	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.
Чому можна навчитися (результати навчання)	<p>Програмні результати навчання.</p> <ul style="list-style-type: none"> – 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; <p>використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації даних.</p>
Як можна користуватися набутими знаннями і вміннями (компетентності)	<p>Загальні компетентності:</p> <ul style="list-style-type: none"> – здатність до абстрактного мислення, критичного аналізу, оцінки 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. <p>Фахові компетентності:</p> <ul style="list-style-type: none"> – 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;

	<ul style="list-style-type: none"> – 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.
Навчальна логістика	<p>ЗМІСТ ДИСЦИПЛІНИ</p> <p>Змістовний модуль 1. Комп'ютерні технології в хімії</p> <p>Тема 1.1. Вступ: мета і завдання курсу. Програми для візуалізації хімічних структур.</p> <p>Вступ: мета і завдання курсу. Ліцензії на програмне забезпечення.</p> <p>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.</p> <p>Тема 1.2. Створення молекулярних моделей за допомогою спеціального програмного забезпечення.</p> <p>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. Використання автоматичної перевірки та аналізу будови хімічної структури.</p> <p>1-D рівень представлення хімічних структур. Кодування SMILES, сновні принципи побудови, переваги та недоліки застосування.</p> <p>Представлення і візуалізація хімічних структур на 2D рівні. Генерація систематичної назви, кодів SMILES і InChI, розрахункових значень фізико-хімічних параметрів в програмах MarvinSketch, ChemDraw та ChemSketch.</p> <p>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.</p> <p>Тема 1.3. Інтеграція даних спеціалізованих програм до програм пакету MS Office.</p> <p>Інтеграція результатів, отриманих в редакторах MarvinSketch, ChemDraw, ChemSketch та програмі 3D Viewer, до програм пакету MS Office – Word, Excel, Access, Power Point. Методи вставки даних – як об'єкт, як рисунок.</p>

Можливість подальшого редагування об'єкту. Вбудовування даних файлів формату *.cdx.

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, e-Molecules, COMMON CHEMISTRY (CAS), Organic Syntheses.

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.

Тема 2.3. Пошук інформації з хімії у мережі Internet.

Основні онлайнові 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.

ВИДИ ЗАНЯТЬ

Лабораторні роботи, самостійна робота.

МЕТОДИ НАВЧАННЯ

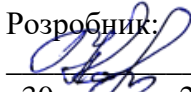
Методи навчання, що використовуються при викладанні дисципліни «Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії» можна розподілити на наступні групи:

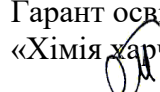
- методи навчання, які за джерелами знань розподіляють на словесні (розповідь, пояснення, лекція, інструктаж) та наочні (демонстрація, ілюстрація);
- методи навчання, які за характером логіки пізнання розподіляють на аналітичний, синтетичний, аналітико-синтетичний, індуктивний, дедуктивний;
- методи навчання, які за рівнем самостійної розумової діяльності розподіляють на проблемний, частково-пошуковий, дослідницький.

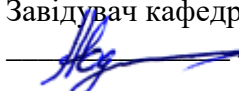
Для поліпшення викладання лекційного матеріалу передбачено використання кожним студентом під час лекцій дидактичних засобів навчання (слайдів або плакатів та роздавального матеріалу); передбачено постановка проблемних питань при викладанні матеріалу з кожної теми, максимальне використання статистичних даних та наукової

	літератури; використання відповідних комп'ютерних програм.
Пререквізити	Вища математика, іноземна мова, інформатика, неорганічна хімія, фізична хімія
Постреквізити	Аналітична хімія, органічна хімія, обчислювальні методи в хімії, обробка результатів експерименту, харчова хімія, курсова робота з органічної хімії, курсова робота з харчової хімії, хімія харчових добавок.
Політика курсу	Курс передбачає індивідуальну та групову роботу. Усі завдання, передбачені програмою, мають бути виконані у встановлений термін. Якщо здобувач відсутній з поважної причини, він/вона презентує виконані завдання під час консультації викладача. Під час роботи над індивідуальними завданнями та проектами не допустимо порушення академічної доброчесності. Презентації та виступи мають бути авторськими оригінальними
Оцінювання досягнень	При визначенні загальної оцінки враховуються результати поточного контролю з практичних та лабораторних занять, які відбулися в період, а також результати захисту індивідуальних завдань та самостійної роботи. Залік за системою ЕКТС отримують здобувачі, які виконали всі види робіт і набрали не менше 55 зі 100 балів за результатами навчання. 55-100 балів - виставляється, якщо здобувач виявив певні знання основного програмного матеріалу в обсязі, що необхідний для подальшого навчання і роботи, у цілому впорався з поставленим завданням, припустився незначних помилок в арифметичних розрахунках, демонстрував здатність упоратися з виконанням завдань, передбачених програмою на рівні репродуктивного відтворення. 0-55 балів – «Не зараховано» - виставляється, якщо здобувач виявив серйозні прогалини в знаннях основного матеріалу, зробив принципові помилки, не зміг розв'язати типові задачі, провести розрахунки тощо.
Інформаційне забезпечення	Основна 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. Додаткова література:

	<p>1 Ракша О. В. Інформаційні технології у фізичній хімії: навчально-методичний посібник / О. В. Ракша. – Донецьк: ДонНУ, 2013. – 98 с.</p> <p>2 Конспект лекцій (опорний) з дисципліни “Комп’ютерна хімія” / уклад.: М. Л. Кулігін. – Херсон: ХНТУ, 2013 – 80 с.</p> <p>3 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. Свечнікова, Т.Я. Грановська. – Харків, 2018. – 92с.</p> <p>4 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.</p> <p>5 Гужва В. М. Інформаційні системи і технології на підприємствах : навч. посібник.- К: КНЕУ, 2001. - 400 с.</p> <p>Посилання на розроблений електронний курс: сторінка кафедри http://www.dgma.donetsk.ua/obschaya-informatsiya-hiop.html Moodle http://moodle.dgma.donetsk.ua/course/view.php?id=1412</p>
--	--

Розробник:
 / Коновалова С.О./
«30» серпня 2022 р.

Гарант освітньої програми:
«Хімія харчових продуктів»
 / Турчанін М. /
« 1 » вересня 2022 р.

Розглянуто і схвалено
на засіданні кафедри
хімії та ОП ДДМА
Протокол № 1 від 30.08.2022 р.
Завідувач кафедри
 / Авдєєнко А.П. /

