

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича

(повне найменування закладу вищої освіти)

Інститут біології, хімії та біоресурсів

(назва інституту/факультету)

Кафедра хімічного аналізу, експертизи та безпеки харчової продукції

(назва кафедри)

СИЛАБУС

навчальної дисципліни

Комп'ютерна хімія

(вказати назву навчальної дисципліни (іноземною, якщо дисципліна викладається іноземною мовою))

обов'язкова

(вказати: обов'язкова)

Освітньо-професійна програма Хімія

(назва програми)

Спеціальність 102 — «Хімія»

(вказати: код, назва)

Галузь знань 10 — «Природничі науки»

(вказати: шифр, назва)

Рівень вищої освіти другий (магістерський)

(вказати: перший (бакалаврський)/другий (магістерський)/третій (освітньо-науковий))

Інститут біології, хімії та біоресурсів

(назва факультету/інституту, на якому здійснюється підготовка фахівців за вказаною освітньо-професійною програмою)

Мова навчання українська

(вказати: на яких мовах читається дисципліна)

Розробники: Дійчук Володимир Васильович, кандидат хімічних наук, асистент кафедри хімічного аналізу, експертизи та безпеки харчової продукції

(вказати авторів (викладач (ів)), їхні посади, наукові ступені, вчені звання)

Профайл викладача (-ів) <http://ibhb.chnu.edu.ua/profile/user/61>

Контактний тел. +380664357987

E-mail: v.dychuk@chnu.edu.ua

Сторінка курсу в Moodle <https://moodle.chnu.edu.ua/course/view.php?id=2978>

Консультації Очні та он-лайн консультації за попередньою домовленістю

1. Анотація дисципліни (призначення навчальної дисципліни).

Навчальна дисципліна «Комп'ютерна хімія» – вибірковий освітній компонент циклу професійної та практичної підготовки здобувачів другого (магістерського) освітнього рівня спеціальності 102 «Хімія». Оволодіння навичками використання комп'ютерних програм для вирішення практичних задач є важливою компетентністю майбутнього фахівця хіміка

2. Мета навчальної дисципліни: ознайомлення студентів з можливостями застосування сучасних комп'ютерних програм для вирішення задач, пов'язаних з хімічними перетвореннями, навчання моделювати просторову будову хімічних речовин, проводити розрахунки їх енергетичних характеристик, прогнозувати реакційну здатність, аналізувати і оцінювати отримані результати.

3. Пререквізити. Для ефективного засвоєння матеріалу студенти повинні ознайомитись з такими дисциплінами як «Органічна хімія», «Фізична хімія», «Загальна хімія», «Квантова хімія», «Інформатика», «Вища математика».

4. Результати навчання За результатами навчання студенти освоюють комп'ютерні програми для розрахунків характеристик будови і властивостей сполук, їх реакційної здатності та енергетичних показників. Для цього здобувачі повинні:

знати: закони і методи комп'ютерної хімії;

вміти: використовувати сучасні комп'ютерні програми для розв'язання задач, пов'язаних з моделюванням будови хімічних сполук та розрахунком показників їх реакційної здатності.

5. Опис навчальної дисципліни

5.1. Загальна інформація

Назва навчальної дисципліни <u>Комп'ютерна хімія</u>												
Форма навчання	Рік підготовки	Семестр	Кількість			Кількість годин						Вид підсумкового контролю
			кредитів	годин	змістових модулів	лекції	практичні	семінарські	лабораторні	самостійна робота	індивідуальні завдання	
Денна	1	1	4	120	2	-	30	-	-	90	-	залік
Заочна												

5.2. Дидактична карта навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин														
	усього	денна форма						заочна форма							
		у тому числі						усього	у тому числі						
		л	п	лаб	інд	с.р.	л		п	лаб	інд	с.р.			
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13			
Теми лекційних занять	Змістовий модуль 1. Використання програм ISIS DRAW і ChemDraw														
Тема 1. Створення хімічних формул і розрахунок елементного складу сполук з використанням програми ISIS DRAW.	30	-	6	-	-	24									
Тема 2. Створення хімічних формул та ланцюгів перетворень з використанням	28	-	8	-	-	20									

програми ChemDraw.													
Разом за ЗМ1	58	-	14	-	-	44							
Теми лекційних занять	Змістовий модуль 2. Використання програм ChemOffice і HyperChem												
Тема 1. Розрахунок енергетичних характеристик молекул органічної сполуки з використанням ChemOffice.	30	-	8	-	-	22							
Тема 2. Розрахунок заряду на атомах та розподілу електростатичного потенціалу в молекулі органічної сполуки з використанням програми HyperChem.	32	-	8	-	-	24							
Разом за ЗМ 2	62	-	16	-	-	46							
Усього годин	120	-	30	-	-	90							

5.3. Зміст завдань для самостійної роботи

№	Назва теми
1	Основні одиниці вимірювань у комп'ютерній хімії
2	
...	

* ІНДЗ – для змістового модуля, або в цілому для навчальної дисципліни за рішенням кафедри (викладача).

6. Система контролю та оцінювання

Види та форми контролю

1. **Поточний** контроль успішності проводиться у вигляді перевірки виконання розрахунково-графічних робіт.
2. **Модульний** контроль здійснюється у формі презентації результатів виконаних розрахункових завдань.
3. Форма **підсумкового** контролю – залік.

Засоби оцінювання

1. розрахункові, графічні, розрахунково-графічні роботи;
2. презентації результатів виконаних завдань та досліджень;

Критерії оцінювання результатів навчання з навчальної дисципліни

Критерієм успішного проходження здобувачем освіти підсумкового оцінювання є досягнення ним мінімальних порогових оцінок за кожним запланованим результатом навчання – сума балів за всі модулі має бути не меншою за 30, а разом підсумковим контролем – не менше 50 (половина всіх можливих балів).

Розподіл балів, які отримують студенти

Поточне оцінювання (аудиторна та самостійна робота)				Кількість балів (залік)	Сумарна к-ть балів
Змістовий модуль №1		Змістовий модуль № 2			
T1	T2	T3	T4	40	100
15	15	15	15		

T1, T2 ... T9 – теми змістових модулів.

5. Рекомендована література -основна

1. Стеценко Н.О. Основи комп'ютерної хімії біологічно активних речовин: [конспект лекцій для студентів спеціальності 8.05170109 «Технології харчових продуктів оздоровчого та профілактичного призначення» денної форми навчання] / Н.О. Стеценко, Л.С. Дегтярьов, Н.Е. Фролова, В.Д. Іванова. – К.: НУХТ, 2012. – 87 с.
2. Туровська О. М. Практикум з квантової хімії. Навчально-методичний посібник / О. М. Туровська, М.А. Туровський. Донецьк: ДонНУ, 2007. – 81 с.
3. Аминова Р.М. Расчеты электронного строения и свойств молекул полуэмпирическими методами квантовой химии: учебное пособие / Р.М. Аминова – Казань, 1997. –71 с.
4. Кобзев Г.И. Применение неэмпирических и полуэмпирических методов в квантово-химических расчетах : учебное пособие / Г.И. Кобзев– Оренбург : ГОУ ОГУ, 2004. – 150 с.
5. Кобычев В. Б. Квантовая химия на ПК: Компьютерное моделирование молекулярных систем : учеб.-метод. пособие / В.Б. Кобычев– Иркутск : Иркут. гос. ун-т, 2006. – 87 с.
6. Ковальчук Є. Основи квантової хімії / Ковальчук Є. – К.: ІЗМН, 1996. – 312 с.
7. Манаенков О.В. Моделирование структуры химических соединений с помощью пакетов программ ACD/Chemsketch, Chemoffice, Hyperchem: учебное пособие / О.В. Манаенков, Ю.Ю. Косивцов, Э.М. Сульман. – Тверь: ТвГТУ, 2013. – 84 с.
8. Полещук О.Х. Методические указания к лабораторным работам по компьютерному моделированию химических реакций / О.Х. Полещук, Д.М. Кижнер. – Томск: Изд-во ТГПУ, 2007. – 160 с.
9. Протопопов А.В. Визуализация химических структур и молекулярное моделирование. Методическое пособие по работе в химических редакторах для приобретения навыков по визуализации химических структур, а также основ молекулярного моделирования / А.В. Протопопов, В.В. Коньшин. – Барнаул: Типография АлтГТУ, 2011. – 44 с.
10. Резников А.А. Математическое моделирование структуры соединений с помощью пакета программ HyperChem 7.5.: [учебно-методическое пособие] / А.А. Резников, В.А. Шапошников. – Воронеж, 2006. – 44 с.
11. Семенов А.В. Изображение, построение и моделирование структур молекул: сборник заданий и методические указания к выполнению лабораторных, расчетно-графических и курсовых работ. / А.В. Семенов Тверь: ТвГТУ, 2005. – 65 с.

6. Інформаційні ресурси

Система підтримки дистанційного навчання “Moodle”.