

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА  
ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ  
Кафедра неорганічної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана

навчальної роботи

Наталія УСЕНКО

30 » 06 2022 року



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ  
ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ В ХІМІЇ

для здобувачів освіти

галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	102 Хімія
освітній рівень	бакалавр
освітня програма	Хімія
вид дисципліни	обов'язкова

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2022/2023
Семестр	2
Кількість кредитів ECTS	4
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	залік

Викладачі: проф. Неділько С.А., ас. Наумова Д.Д., ас. Давиденко Ю.М.

Пролонговано: на 20\_\_/20\_\_ н.р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

на 20\_\_/20\_\_ н.р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

КИЇВ – 2022

Розробник:

Неділько Сергій Андрійович, д.х.н., професор, професор кафедри неорганічної хімії.

ЗАТВЕРДЖЕНО

В.о. завідувача кафедри неорганічної хімії

 Ростислав ЛАМПЕКА

Протокол № 11 від «\_11\_» травня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол від «29» червня 2022 року № 7

Голова науково-методичної комісії  Олександр РОЇК

«30» червня 2022 року.

**1. Мета навчальної дисципліни** – засвоєння студентами основних принципів обробки хімічної інформації та методів використання хімічних технологій при проведенні хімічних досліджень. Навчити студентів самостійно мислити. Це дозволить їм вибирати потрібні для вирішення конкретних задач програми комп'ютерні і вірно інтерпретувати одержані результати. Інформаційні технології – наука про властивості інформації, її накопичення та використання комп'ютерної техніки для обробки інформації з метою розвитку хімічної науки.

## **2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни**

Курс «Інформаційні технології в хімії» базується на знаннях шкільного курсу інформатики і математики (рівняння і системи рівнянь, дії зі степенями і коренями, середні величини, натуральні та десяткові логарифми, пропорційність, функції та їх графіки). Матеріал дисципліни допомагає вивченню неорганічної, аналітичної, органічної, фізичної, колоїдної хімії, а також ряду дисциплін за профілем майбутньої спеціальності.

## **3. Анотація навчальної дисципліни**

Предмет навчальної дисципліни «Інформаційні технології в хімії» побудований таким чином, щоб дати студентам уявлення про можливості використання інформаційних технологій при вивченні, проведенні хімічних досліджень та обґрунтуванню результатів дослідів.

Програма курсу складається з двох розділів. Перший розділ присвячений розгляду загальних понять інформатики. Після короткого історичного екскурсу обговорюється сучасний стан інформаційних технологій, її проблеми й значення для розвитку хімічного виробництва.

У другому розділі студентам одержують відомості про основні можливості застосування хімічних технологій для пояснення, передбачення та планування хімічного експерименту. Вмінню створювати математичні моделі різних хімічних процесів.

## **4. Завдання (навчальні цілі):**

- використовувати комп'ютерні технології в усіх хімічних дисциплінах;
- мати основні навички програмування;
- ознайомиться з прикладними програмами, які використовують для вирішення задач обробки експерименту;
- основами математичного моделювання хімічних процесів;
- провести статистичну обробку результатів хімічного експерименту.

Зміст курсу входить в обов'язковий мінімум професійних знань хіміка. Знання основних законів хімії, вміння складати хімічні рівняння, розуміти їх, виконувати по ним розрахунки, прогнозувати можливий характер хімічних процесів і властивості одержаних сполук, а також наявність відповідних навичок та вміле володіння технікою проведення експерименту є необхідними умовами успішної професійної діяльності в будь-якій галузі застосування хімії.

Згідно з вимогами Стандарту вищої освіти України (перший (бакалаврський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 102 – «Хімія») навчальна дисципліна спрямована на досягнення наступних загальних та спеціальних (фахових) компетентностей: ЗК3, ЗК5, ЗК10 та СК1, СК4, СК5, СК10.

## 5. Результати навчання за дисципліною:

Результати навчання (1. знати; 2, вміти; 3, комунікація; 4, автономність та відповідальність)		Форма (та/або методи і технології викладання і навчання)	Методи оцінювання* та порогів критерій оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результати навчання			
1.1	Знати та розуміти основні відомості про інформатику, основні напрямки в інформатиці. Знати термінологію та номенклатуру основних напрямків в інформатиці.	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	ПКК, ПТК, ОДР	10
1.2	Знати основні поняття Алгебри-логіки.	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	ПКК, ПТК, ОДР	10
1.3	Знати та розуміти особливості виконання обчислень на ЕОМ та програм загального користування та знати комп'ютерні програми спеціального призначення.	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	ПКК, ПТК, ОДР	15
2.1	Вміти використовувати пакети програм для написання хімічних формул органічних та неорганічних речовин.	Лабораторний практикум	ПКК, ПТК, ОДР	15
2.2	Використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.	Лабораторний практикум, самостійні роботи	ПКК, ПТК, ОДР	10
2.3	Вміти будувати графіки за допомогою <i>Microcal</i> або <i>Origin</i> .	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	ПКК, ПТК, ОДР	10
2.4	Вміти розв'язувати елементарні логічні функції.	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	ПКК, ПТК, ОДР	10
3.1	Здатність до фахового спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією.	Лекції, лабораторний практикум	ПКК, ПТК, ОДР	5

\*письмові курсові колоквиуми (ПКК)

групові письмові тематичні контрольні роботи (ПТК)

обов'язкові домашні (самостійні) роботи (ОДР)

## 6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Програмні результати навчання (назва)	Результати навчання дисципліни(код)								
	1	1	1	2	2	2	2	3	
	1	2	3	1	2	3	4	1	
P16. Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.	+	+	+						
P17. Працювати самостійно або в групі, отримати результат у межах обмеженого часу з наголосом на професійну сумлінність та наукову добросовісність.				+	+	+			
P24. Використовувати сучасні інформаційно комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації даних.						+	+	+	

## 7. Схема формування оцінки

### 7.1. Форми оцінювання студентів:

#### Семестрове оцінювання:

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **100 балів /60 балів**, а саме:

1. Контрольна робота №1: – **20/12 балів**.
2. Контрольна робота №2: – **20/12 балів**.
3. Усна доповідь з презентацією: – **20/12 балів**.
4. Лабораторні роботи № 1–4: – **20/12 балів**.
4. Лекційні завдання: : – **20/12 балів**.

**Підсумкове оцінювання (у формі заліку):** Залік виставляється за результатами роботи студента впродовж усього семестру і не передбачає додаткових заходів оцінювання для успішних студентів.

### 7.2. Організація оцінювання:

Терміни проведення оцінювання:

Контрольна робота №1: не раніше **6 тижня** семестру;

Контрольна робота №2: не раніше **12 тижня** семестру;

Усна доповідь з презентацією: виконується до **6 тижня** семестру;

Лабораторна робота № 1: виконується до **7-8 тижня** семестру;

Лабораторна робота № 2: виконується впродовж **9–10 тижня** семестру;

Лабораторна робота № 3: виконується впродовж **11–13 тижня** семестру;

Лабораторні роботи № 4: виконується впродовж **14–15 тижня** семестру;

Лекційні завдання: виконується впродовж **11–15 тижня** семестру;

### 7.3. Шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень / Marks
<b>Зараховано / Passed</b>	60-100
<b>Не зараховано / Fail</b>	0-59

## 8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ. ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН.

№	Назва	Кількість годин		
		Лекції	Практичні	Самостійна робота
<b>Змістовий модуль 1. «Інформатика як наука. Інформація. Обробка інформації. Обчислювальна техніка.»</b>				
1	<b>Тема 1.</b> Предмет інформатики. Інформація.	6	6	12
2	<b>Тема 2.</b> Обчислювальна техніка. Програмування.	4	4	8
	<b>Тема 3.</b> Програмне забезпечення комп'ютера. Програми загального користування.	4	6	8
	<b>Модульна контрольна робота 1</b>			
<b>Змістовий модуль 2 «Інформаційні технології в хімії.»</b>				
3	<b>Тема 4.</b> Комп'ютерні програми загального користування і спеціального користування.	6	8	12
4	<b>Тема 5.</b> Математичні методи в хімії.	10	8	18
	<b>Модульна контрольна робота 2</b>			

Загальний обсяг 120 год., в тому числі:

Лекцій – 28 год.

Практичні заняття - 30 год.

Самостійна робота - 62 год.

## **9. Рекомендовані джерела:**

### ***Основні: (Базова)***

1. Косинська В.І., Швець О.Ф. Сучасні інформаційні технології. К.: Знання. – 2011. 320 с.
2. Глинський Я. М. Інформатика. Практикум з інформаційних технологій: Навч. посіб.: Підручники і посібники, 2014. – 304 с.
3. Брановицька С.В., Медведів Р.Б., Фіалков Ю.Я. Обчислювальна математика в хімії та хімічній технології. К: Вища школа. – 1986. 216 с.
4. Неділько С.А. Математичні методи в хімії. К.: Либідь, 2005.
5. Неділько С.А. Інформаційні технології в хімії. К.: Київський університет, 2015.
6. Чалий О.В., Дяков В.А., Хаїмзон І.І. Основи інформатики. К., Вища школа. 1993. 114 с.
7. Johnson, K. J. Numerical Methods in Chemistry. New York, 1982. 503 p.

### ***Додаткові:***

1. Дибкова Л. М. Інформатика і комп'ютерна техніка : Навч. посіб. К. : Академвидав. – 2012. – 463 с.
2. Рудавський Ю.К., Мокрий Є.М., Піх З.Г., Чип М.М., Куриляк І.Й. Математичні методи в хімії та хімічній технології. Навчальн. посіб. для студентів вузів. Львів: Світ, 1993.
3. Мараховський Л. Ф. Інформатика і комп'ютерна техніка : Практикум. – Навч. посіб. Т.т. 2 томів. К. : ДЕТУТ, 2012. – 500 с.
4. Наливайко Н. Я. Інформатика. К. : Центр учбової літератури, 2011. – 576 с.

*В тому числі й інтернет ресурси*