

**Силабус
вибіркового компоненту**

Комп'ютерні технології в інженерій хімії

Назва дисципліни:	Комп'ютерні технології в інженерій хімії
Рівень вищої освіти:	першого (бакалаврський)
Сторінка курсу в Moodle:	https://dl2022.khadi-kh.com/course/index.php?categoryid=572
Обсяг освітнього компоненту	3 кредити (90 годин)
Форма підсумкового контролю	залік
Консультації:	за графіком
Назва кафедри:	кафедра хімії та хімічної технології
Мова викладання:	українська
Керівник курсу:	Ненастіна Тетяна Олександрівна, докт. тех. наук, доцент
Контактний телефон:	Кафедри: (057)707-36-52
E-mail:	E-mail кафедри: chemistry@khadi.kharkov

Короткий зміст освітнього компоненту:

Метою є 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.

Предмет: методи та принципи використання комп'ютерних технологій і хімічних технологіях.

Основними завданнями вивчення навчальної дисципліни є:

– формування у студентів цифрової професійно-орієнтованої компетентності та спрямована на вивчення системного та типового програмного забезпечення персональних комп'ютерів;

– 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.

Передумови для вивчення освітнього компоненту:

Вища математика, Фізика, Хімія, Інформатика.

Компетентності, яких набуває здобувач:

Загальні компетентності:

Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

Здатність працювати у команді.

Здатність до адаптації та дії в новій ситуації.

Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій.

Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

Спеціальні (фахові) компетентності:

Здатність застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії.

Здатність розпізнавати і аналізувати проблеми, застосовувати обґрунтовані методи вирішення проблем, приймати обґрунтовані рішення в області хімії.

Здатність до використання спеціального програмного забезпечення та моделювання в хімії.

Здатність здійснювати сучасні методи аналізу даних.

Результати навчання:

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.

Тематичний план

№ теми	Назва тем (ЛК, ЛР, ПР, СЗ, СР)	Кількість годин	
		очна	заочна
1	ЛК. Будова комп'ютера. Основи роботи в операційній системі WINDOWS	2	
	ЛР. Робота в Paint	2	
	ЛР. Створення та редагування таблиць засобами текстового редактору	2	
	СР. Текстовий процесор	9	
2	ЛК. Табличний процесор (Excel). Обчислення коефіцієнта детермінації.	2	
	ЛР. Введення та форматування даних у табличному редакторі	2	
	СР. Табличний процесор	9	
3	ЛК. Метод апроксимації та побудова лінії тренду в Microsoft Excel	2	
	ЛР. Робота з формулами у табличному процесорі	2	
	СР. Створення та редагування таблиць засобами табличного редактору	10	
4	ЛК. Пошук і аналіз наукової бібліографічної інформації	2	
	СР. Інформаційні ресурси в мережі Інтернет	10	
5	ЛК. ChemDraw	4	
	ЛР. Зображення хімічних структур і реакцій за допомогою програми ChemDraw	4	
	СР. Використання програми ChemDraw в хімічній технології	10	
6	ЛК. Origin	4	
	ЛР. Робота з графічними об'єктами у Origin	4	
	СР. Використання програми Origin в хімічній технології	10	
Разом	ЛК	16	
	ЛР	16	
	СР	58	
	Залік		

Методи навчання:

1) словесні: 1.1 традиційні: лекції, пояснення, розповідь тощо;

- 1.2 інтерактивні (нетрадиційні): проблемні лекції, дискусії тощо;
- 2) наочні: метод ілюстрацій, метод демонстрацій
- 3) лабораторні: 3.1 традиційні: лабораторні заняття, семінари;
- 3.2 інтерактивні (нетрадиційні): ділові, тренінги, семінари-дискусії.

Система оцінювання та вимоги:

Поточна успішність

1 Поточна успішність здобувачів за виконання навчальних видів робіт на навчальних заняттях і за виконання завдань самостійної роботи оцінюється за допомогою чотирибальної шкали оцінок з наступним перерахуванням у 100-бальною шкалу. Під час оцінювання поточної успішності враховуються всі види робіт, передбачені навчальною програмою.

1.1 Лекційні заняття оцінюються шляхом визначення якості виконання конкретизованих завдань.

1.2 Лабораторні заняття оцінюються якістю виконання звітів про виконання лабораторних робіт; виконанням контрольного або індивідуального завдань чи тестів.

2 Оцінювання поточної успішності здобувачів вищої освіти здійснюється на кожному лабораторному занятті за чотирибальною шкалою («5», «4», «3», «2») і заносяться у журнал обліку академічної успішності.

– «відмінно»: здобувач бездоганно засвоїв теоретичний матеріал, демонструє глибокі знання з відповідної теми або навчальної дисципліни, основні положення;

– «добре»: здобувач добре засвоїв теоретичний матеріал, володіє основними аспектами з першоджерел та рекомендованої літератури, аргументовано викладає його; має практичні навички, висловлює свої міркування з приводу тих чи інших проблем, але припускається певних неточностей і похибок у логіці викладу теоретичного змісту або при аналізі практичного;

– «задовільно»: здобувач в основному опанував теоретичні знання навчальної теми, або дисципліни, орієнтується у першоджерелах та рекомендованій літературі, але непереконливо відповідає, плутає поняття, невпевнено відповідає на додаткові питання, не має стабільних знань; відповідаючи на питання практичного характеру, виявляє неточність у знаннях, не вміє оцінювати факти та явища, пов'язувати їх із майбутньою професією;

– «незадовільно»: здобувач не опанував навчальний матеріал теми (дисципліни), не знає наукових фактів, визначень, майже не орієнтується в першоджерелах та рекомендованій літературі, відсутнє наукове мислення, практичні навички не сформовані.

3 Підсумковий бал за поточну діяльність визнається як середньоарифметична сума балів за кожне заняття, за індивідуальну роботу, поточні контрольні роботи за формулою:

$$K^{поточ} = \frac{K_1 + K_2 + \dots + K_n}{n},$$

де: $K^{поточ}$ – підсумкова оцінка успішності за результатами поточного контролю;

$K_1, K_2, \dots, K_n$ – оцінка успішності n -го заходу поточного контролю;

n – кількість заходів поточного контролю.

Оцінки конвертуються у бали згідно шкали перерахунку (таблиця 1).

Таблиця 1 – Перерахунок середньої оцінки за поточну діяльність у багатобальну шкалу

4-бальна шкала	100-бальна шкала	4- бальна шкала	100-бальна шкала	4- бальна шкала	100-бальна шкала	4- бальна шкала	100- бальна шкала
5	100	4,45	89	3,90	78	3,35	67
4,95	99	4,4	88	3,85	77	3,3	66
4,9	98	4,35	87	3,80	76	3,25	65
4,85	97	4,3	86	3,75	75	3,2	64
4,8	96	4,25	85	3,7	74	3,15	63
4,75	95	4,20	84	3,65	73	3,1	62
4,7	94	4,15	83	3,60	72	3,05	61
4,65	93	4,10	82	3,55	71	3	60
4,6	92	4,05	81	3,5	70	від 1,78 до 2,99	від 35 до 59
						повторне складання	
4,55	91	4,00	80	3,45	69	від 0 до 1,77	від 0 до 34
4,5	90	3,95	79	3,4	68	повторне вивчення	

Підсумкове оцінювання

1 Здобувач вищої освіти отримує залік на останньому занятті з дисципліни за результатами поточного оцінювання. Середня оцінка за поточну діяльність конвертується у бали за 100-бальною шкалою, відповідно до таблиці перерахунку (таблиця 1).

Здобувачі вищої освіти, які мають середню поточну оцінку з дисципліни нижче ніж «3» (60 балів), на останньому занятті можуть підвищити свій поточний бал шляхом складання тестів з дисципліни. Оцінювання знань здобувачів шляхом тестування здійснюється за шкалою:

- «Відмінно»: не менше 90 % правильних відповідей;
- «Дуже добре»: від 82 % до 89 % правильних відповідей;
- «Добре»: від 74 % до 81 % правильних відповідей;
- «Задовільно»: від 67 % до 73% правильних відповідей;
- «Задовільно достатньо»: від 60 % до 66 % правильних відповідей;
- «Незадовільно»: менше 60 % правильних відповідей.

2 Умовою отримання заліку є:

- відпрацювання всіх пропущених занять;
- середня поточна оцінка з дисципліни не нижче «3» (60 балів).

3 За виконання індивідуальної самостійної роботи та участь у наукових заходах здобувачам нараховуються додаткові бали.

3.1 Додаткові бали додаються до суми балів, набраних здобувачем вищої освіти за поточну навчальну діяльність (для дисциплін, підсумковою формою контролю для яких є залік), або до підсумкової оцінки з дисципліни, підсумковою формою контролю для якої є екзамен.

3.2 Кількість додаткових балів, яка нараховується за різні види індивідуальних завдань, залежить від їх об'єму та значимості:

- призові місця з дисципліни на міжнародному / всеукраїнському конкурсі наукових студентських робіт – 20 балів;
- призові місця з дисципліни на всеукраїнських олімпіадах – 20 балів;
- участь у міжнародному / всеукраїнському конкурсі наукових студентських робіт – 15 балів;

- участь у міжнародних / всеукраїнських наукових конференціях студентів та молодих вчених – 12 балів;
- участь у всеукраїнських олімпіадах з дисципліни – 10 балів;
- участь в олімпіадах і наукових конференціях ХНАДУ з дисципліни – 5 балів;
- виконання індивідуальних науково-дослідних (навчально-дослідних) завдань підвищеної складності – 5 балів.

3.3 Кількість додаткових балів не може перевищувати 20 балів.

4 Результат навчання оцінюється (обрати потрібне):

- за двобальною шкалою (зараховано/не зараховано) згідно з таблицею 2;
- за 100-бальною шкалою (для диференційованого заліку) згідно з таблицею 3.

Підсумкова оцінка разом з додатковими балами не може перевищувати 100 балів.

Загальна підсумкова оцінка за вивчення навчальної дисципліни визначається згідно зі шкалою, що наведено в таблиці 2.

Таблиця 2 – Шкала оцінювання знань здобувачів за результатами підсумкового контролю з навчальної дисципліни

Оцінка в балах	Оцінка за національною шкалою екзамен	Оцінка за шкалою ЄКТС	
		Оцінка	Критерії
90-100	Відмінно	A	Теоретичний зміст курсу освоєний цілком, без прогалин, необхідні практичні навички роботи з освоєним матеріалом сформовані, усі передбачені програмою навчання навчальні завдання виконані, якість їхнього виконання оцінено числом балів, близьким до максимального
80-89		B	Теоретичний зміст курсу освоєний цілком, без прогалин, необхідні практичні навички роботи з освоєним матеріалом в основному сформовані, усі передбачені програмою навчання навчальні завдання виконані, якість виконання більшості з них оцінено числом балів, близьким до максимального
75-79	Добре	C	Теоретичний зміст курсу освоєний цілком, без прогалин, деякі практичні навички роботи з освоєним матеріалом сформовані недостатньо, усі передбачені програмою навчання навчальні завдання виконані, якість виконання жодного з них не оцінено мінімальним числом балів, деякі види завдань виконані з помилками
67-74		D	Теоретичний зміст курсу освоєний частково, але прогалини не носять істотного характеру, необхідні практичні навички роботи з освоєним матеріалом в основному сформовані, більшість передбачених програмою навчання навчальних завдань виконано, деякі з виконаних завдань, можливо, містять помилки
	Задовільно		

Оцінка в балах	Оцінка за національною шкалою екзамен	Оцінка за шкалою ЄКТС	
		Оцінка	Критерії
60–66	Незадовільно	E	Теоретичний зміст курсу освоєний частково, деякі практичні навички роботи не сформовані, багато передбачених програмою навчання навчальних завдань не виконані, або якість виконання деяких з них оцінено числом балів, близьким до мінімального.
35–59		FX	Теоретичний зміст курсу освоєний частково, необхідні практичні навички роботи не сформовані, більшість передбачених програм навчання навчальних завдань не виконано, або якість їхнього виконання оцінено числом балів, близьким до мінімального; при додатковій самостійній роботі над матеріалом курсу можливе підвищення якості виконання навчальних завдань (з можливістю повторного складання)
0–34	Неприйнятно	F	Теоретичний зміст курсу не освоєно, необхідні практичні навички роботи не сформовані, усі виконані навчальні завдання містять грубі помилки, додаткова самостійна робота над матеріалом курсу не приведе до якого-небудь значущого підвищення якості виконання навчальних завдань (з обов'язковим повторним курсом)

Політика курсу:

- курс передбачає роботу в колективі, середовище в аудиторії є дружнім, творчим, відкритим до конструктивної критики;
- освоєння дисципліни передбачає обов'язкове відвідування лекцій і лабораторних занять, а також самостійну роботу;
- самостійна робота передбачає вивчення окремих тем навчальної дисципліни, які винесені відповідно до програми на самостійне опрацювання, або ж були розглянуті стисло;
- усі завдання, передбачені програмою, мають бути виконані у встановлений термін;
- якщо здобувач вищої освіти відсутній на заняттях з поважної причини, він презентує виконані завдання під час самостійної підготовки та консультації викладача;
- під час вивчення курсу здобувачі вищої освіти повинні дотримуватись правил академічної доброчесності, викладених у таких документах: «Правила академічної доброчесності учасників освітнього процесу ХНАДУ» (https://www.khadi.kharkov.ua/fileadmin/P_Standart/pologeniya/stvnz_67_01_dobroch_1.pd), «Академічна доброчесність. Перевірка тексту академічних, наукових та кваліфікаційних робіт на плагіат» (https://www.khadi.kharkov.ua/fileadmin/P_Standart/pologeniya/stvnz_85_1_01.pdf), «Морально-етичний кодекс учасників освітнього процесу ХНАДУ» (https://www.khadi.kharkov.ua/fileadmin/P_Standart/pologeniya/stvnz_67_01_MEK_1.pdf).
- у разі виявлення факту плагіату здобувач отримує за завдання 0 балів і повинен повторно виконати завдання, які передбачені у силабусі;

– списування під час контрольних робіт та іспитів заборонені (у т.ч. із використанням мобільних пристроїв). Мобільні пристрої дозволяється використовувати лише під час он-лайн тестування.

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. Учбово-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.

Розробник (розробники)
силабусу навчальної дисципліни


підпис

Тетяна НЕНАСТІНА
ПІБ

Завідувач кафедри
Хімії та хімічної технології


підпис

Тетяна НЕНАСТІНА
ПІБ