



## СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ «КОМП'ЮТЕРНА ХІМІЯ»

Компонента освітньої програми – обов'язкова (4 кредити)

Освітньо-професійна програма	Хімія
Спеціальність	ЕЗ Хімія
Галузь знань	Е Природничі науки, математика та статистика
Рівень вищої освіти	другий (магістрський)
Мова навчання	українська
Профайл викладача	Дійчук Володимир Васильович, к.х.н., асистент <a href="https://chemistry.chnu.edu.ua/kolektiv/diichuk-volodymyr-vasylovych/">https://chemistry.chnu.edu.ua/kolektiv/diichuk-volodymyr-vasylovych/</a>
Контактний тел.	+38(0372)584897
E-mail:	v.diychuk@chnu.edu.ua
Сторінка курсу в Moodle	<a href="https://moodle.chnu.edu.ua/course/view.php?id=2978">https://moodle.chnu.edu.ua/course/view.php?id=2978</a>
Консультації	згідно затвердженого графіка

### АНОТАЦІЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Навчальна дисципліна “Комп’ютерна хімія” є нормативною дисципліною зі спеціальності ЕЗ Хімія для здобувачів вищої освіти другого (магістрського) рівня. Курс призначений для ознайомлення майбутніх фахівців із сучасними методами комп’ютерного моделювання будови, властивостей і реакцій хімічних сполук та матеріалів.

**Мета навчальної дисципліни** - формування у здобувачів освіти системних знань і практичних навичок з використання комп’ютерних методів та програмного забезпечення для моделювання будови, властивостей і реакцій хімічних сполук та матеріалів, що дозволяє вирішувати наукові й прикладні задачі сучасної хімії.

### НАВЧАЛЬНИЙ КОНТЕНТ ОСВІТНЬОЇ КОМПОНЕНТИ

МОДУЛЬ 1.	
Тема 1	Вступ до комп’ютерної хімії. Основні напрямки та програмне забезпечення
Тема 2	Молекулярна механіка, просторова будова і властивості молекул
Тема 3	Напівемпіричні та ab initio методи та їх застосування
Тема 4	Візуалізація просторової структури молекул та моделювання хімічних реакцій
МОДУЛЬ 2.	
Тема 5	Можливості та застосування редактора ChemSketch
Тема 6	Застосування програмного пакета HyperChem
Тема 7	Основи роботи в програмі Gaussian

## **ФОРМИ, МЕТОДИ ТА ОСВІТНІ ТЕХНОЛОГІЇ НАВЧАННЯ**

**Форми навчання:** лекції, лабораторні заняття, консультації, використання системи електронного навчання Moodle.

**Методи навчання:** словесні (лекція, дискусія, консультація), репродуктивні (методичні вказівки до лабораторних робіт), наочні (демонстрація, ілюстрація).

## **ФОРМИ Й МЕТОДИ КОНТРОЛЮ ТА ОЦІНЮВАННЯ**

**Поточний контроль:** усне опитування, оцінювання протоколів та захист лабораторних робіт, проміжний тестовий контроль.

**Підсумковий контроль** – екзамен.

## **КРИТЕРІЇ ОЦІНЮВАННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ НАВЧАННЯ**

Оцінювання програмних результатів навчання здобувачів освіти здійснюється за шкалою європейської кредитно-трансферної системи (ECTS). Критерієм успішного оцінювання є досягнення студентом мінімальних порогових рівнів (50% балів) за кожним запланованим результатом навчання.

## **ПОЛІТИКА ЩОДО АКАДЕМІЧНОЇ ДОБРОЧЕСНОСТІ**

Дотримання політики щодо академічної доброчесності учасниками освітнього процесу при вивченні навчальної дисципліни регламентовано такими документами:

«Етичний кодекс Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича» <https://www.chnu.edu.ua/media/jxdfs0zb/etychnyi-kodeks-chernivetsko-ho-natsionalnoho-universytetu.pdf>

«Положенням про виявлення та запобігання академічного плагіату у Чернівецькому національному університету імені Юрія Федьковича» <https://www.chnu.edu.ua/media/n5nbzwgb/polozhennia-chnu-pro-plahi-at-2023plusdodatky-31102023.pdf>

## **ІНФОРМАЦІЙНІ РЕСУРСИ**

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

*Детальна інформація щодо вивчення курсу «Комп'ютерна хімія» висвітлена у робочій програмі навчальної дисципліни*

<https://chemistry.chnu.edu.ua/diialnist/navchalna/op/mahisterska-op-khimiia/>