



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 https://chemistry.chnu.edu.ua/kolektyv/diichuk-volodymyr-vasylovych/
Контактний тел.	+38(0372)584897
E-mail:	v.diychuk@chnu.edu.ua
Сторінка курсу в Moodle	https://moodle.chnu.edu.ua/course/view.php?id=2978
Консультації	згідно затвердженого графіка

АНОТАЦІЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Навчальна дисципліна “Комп’ютерна хімія” є нормативною дисципліною за спеціальністю 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 використанням комп’ютерних методів та програмного забезпечення для моделювання будови, властивостей і реакцій хімічних сполук та матеріалів, що дає змогу 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 з програмним забезпеченням Orca

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 освітнього компонента регламентовано чинними документами ЧНУ:

- «Кодекс академічної доброчесності та етики Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича»

<https://www.chnu.edu.ua/universytet/normatyvnidokumenty/kodeks-akademichnoi-dobrochesnosti-ta-etyky-chernivetskoho-natsionalnoho-universytetuimeni-yuriia-fedkovycha/>

- «Положенням про виявлення та запобігання академічного плагіату у Чернівецькому національному університеті імені Юрія Федьковича»

<https://www.chnu.edu.ua/universytet/normatyvni-dokumenty/polozhennia-pro-vyivlennia-tazapobihannia-akademichnomu-plahiatu-u-chernivetskomu-natsionalnomu-universyteti-imeni-yuriiafedkovycha/>

- «Політика використання штучного інтелекту в Чернівецькому національному університеті імені Юрія Федьковича»

<https://www.chnu.edu.ua/universytet/normatyvnidokumenty/polityka-vykorystannia-shtuchnoho-intelektu-v-chernivetskomu-natsionalnomu-universytetiimeni-yuriia-fedkovycha-zi-zminamy-zatverdzhenymy-vchenoiu-radoiu-chnu-imeni-yuriia-fedkovycha/>

ВИКОРИСТАННЯ ЗДОБУВАЧАМИ ОСВІТИ ІНСТРУМЕНТІВ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ (ШІ) ПІД ЧАС ВИКОНАННЯ НАВЧАЛЬНИХ ЗАВДАНЬ:

- допускається за умови дотримання принципів академічної доброчесності (здобувач освіти несе відповідальність за зміст, достовірність і результати поданої роботи, а у разі використання ШІ зобов'язаний зазначити факт і спосіб його застосування);

- не допускається використання ШІ як заміни самостійного виконання завдань або з метою порушення вимог академічної доброчесності;
додаткові обмеження чи вимоги щодо використання ШІ можуть визначатися

викладачем в освітньому процесі для конкретних видів навчальної діяльності відповідно до особливостей дисципліни.

ІНФОРМАЦІЙНІ РЕСУРСИ

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

Детальна інформація щодо вивчення курсу «Харчова хімія» висвітлена у робочій програмі навчальної дисципліни

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