


**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ**  
**Львівський національний університет імені Івана Франка**  
**Хімічний факультет**  
**Кафедра неорганічної хімії**

**Затверджено**

На засіданні кафедри неорганічної хімії  
хімічного факультету  
Львівського національного університету  
імені Івана Франка  
(протокол № 1/8 від 29.08.2022 р.)

Завідувач кафедри  
академік НАН України,  
доктор хімічних наук, професор  
 Роман ГЛАДИШЕВСЬКИЙ

**Силабус з навчальної дисципліни**  
**“РОЗРАХУНКОВІ МЕТОДИ В ХІМІЇ ТА МАТЕРІАЛОЗНАВСТВІ”,**  
**що викладається в межах освітньо-професійної програми “ХІМІЯ”**  
**першого (бакалаврського) рівня вищої освіти**  
**для здобувачів зі спеціальності 102 Хімія**

**Львів 2022 р.**

<b>Назва дисципліни</b>	Розрахункові методи в хімії та матеріалознавстві
<b>Адреса викладання дисципліни</b>	Львівський національний університет імені Івана Франка, хімічний факультет (аудиторія № 2), вул. Кирила і Мефодія 6, м. Львів
<b>Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна</b>	Хімічний факультет, кафедра неорганічної хімії
<b>Галузь знань, шифр та назва спеціальності</b>	10 Природничі науки, 102 Хімія
<b>Викладачі дисципліни</b>	Пукас С.Я., кандидат хімічних наук, доцент, доцент кафедри неорганічної хімії Заремба О.І., кандидат хімічних наук, доцент, доцент кафедри неорганічної хімії
<b>Контактна інформація викладачів</b>	svitlana.pukas@lnu.edu.ua (доц. Пукас С.Я.) oksana.zaremba@lnu.edu.ua (доц. Заремба О.І.) <a href="https://chem.lnu.edu.ua/employee/pukas-svitlana-yaroslavivna">https://chem.lnu.edu.ua/employee/pukas-svitlana-yaroslavivna</a> <a href="https://chem.lnu.edu.ua/employee/zaremba-oksana-ivaniivna">https://chem.lnu.edu.ua/employee/zaremba-oksana-ivaniivna</a>
<b>Консультації з питань навчання по дисципліні відбуваються</b>	Очні консультації в день проведення лабораторних занять (за попередньою домовленістю). Дистанційні консультації на платформі MS Teams або ZOOM (для погодження часу слід написати на електронну пошту викладача або зателефонувати).
<b>Сторінка курсу</b>	<a href="https://chem.lnu.edu.ua/course/rozrakhunkovi-metody-v-khimii-ta-materialoznavstvi">https://chem.lnu.edu.ua/course/rozrakhunkovi-metody-v-khimii-ta-materialoznavstvi</a>
<b>Інформація про дисципліну</b>	Дисципліна “Розрахункові методи в хімії та матеріалознавстві” є вибірковою дисципліною зі спеціальності 102 Хімія для освітньо-професійної програми “Хімія” першого (бакалаврського) рівня вищої освіти, яка викладається у восьмому семестрі в обсязі 3 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS). Ця дисципліна продовжує дисципліни “Інформатика і програмування” та “Кристалохімія” і передуює дисципліні “Прикладна кристалохімія”.
<b>Коротка анотація дисципліни</b>	Лекційний курс складається з двох основних частин: програми для обробки експериментальних даних і візуалізації кристалічних структур та бази даних для аналізу великих масивів інформації та пошуку закономірностей. Лабораторні заняття присвячені роботі з фаховими комп’ютерними програмами та базами кристалографічних даних.
<b>Мета та цілі дисципліни</b>	Метою і завданням навчальної дисципліни “Розрахункові методи в хімії та матеріалознавстві” є здобуття студентами навиків опрацювання масивів експериментальних даних, їхня інтерпретація, аналіз з подальшим пошуком закономірностей.
<b>Література для вивчення дисципліни</b>	<b>Основна література:</b> 1. С.Я. Пукас, Конспект лекцій з дисципліни “Розрахункові методи в хімії та матеріалознавстві” (електронний посібник). – Львів: кафедра неорганічної хімії ЛНУ ім. Івана Франка, 2022. 2. International Tables for Crystallography, Volume C: Mathematical, physical and chemical tables. Ed. E. Prince, 2006. 3. International Tables for Crystallography, Volume G: Definition and exchange of crystallographic data. Eds. S.R. Hall, B. McMahon, 2006. 4. M.L. Hackert, L. Van Meervelt, J.R. Helliwell, B. McMahon, Open Data in a Big Data World: A position paper for crystallography, IUCr, 2016. <b>Інформаційні ресурси:</b> 1. <a href="https://products.office.com/en-us/excel">https://products.office.com/en-us/excel</a>

	<ol style="list-style-type: none"> <li>2. <a href="http://www.originlab.com/doc">www.originlab.com/doc</a></li> <li>3. <a href="ftp://ftp.bam.de/Powder_Cell">ftp://ftp.bam.de/Powder_Cell</a></li> <li>4. <a href="http://www.shapesoftware.com">http://www.shapesoftware.com</a></li> <li>5. <a href="http://www.crystalimpact.com/diamond">http://www.crystalimpact.com/diamond</a></li> <li>6. <a href="http://paulingfile.com">http://paulingfile.com</a></li> <li>7. <a href="http://mio.asminternational.org/apd/index.aspx">http://mio.asminternational.org/apd/index.aspx</a></li> <li>8. <a href="http://www.crystalimpact.com/pcd/Default.htm">http://www.crystalimpact.com/pcd/Default.htm</a></li> <li>9. <a href="https://icsd.fiz-karlsruhe.de">https://icsd.fiz-karlsruhe.de</a></li> <li>10. <a href="https://www.ccdc.cam.ac.uk/solutions/csd-system/components/csd">https://www.ccdc.cam.ac.uk/solutions/csd-system/components/csd</a></li> <li>11. <a href="http://www.rcsb.org/pdb">http://www.rcsb.org/pdb</a></li> <li>12. <a href="http://materials.springer.com">http://materials.springer.com</a></li> <li>13. <a href="https://www.iucr.org/iucr">https://www.iucr.org/iucr</a></li> </ol>
<b>Обсяг курсу</b>	<p>Навчальна дисципліна охоплює 3 кредити (90 год). Курс складається з 26 год лекційних занять, 26 год лабораторних занять та 38 год самостійної роботи. Тижневе навантаження студента складає 4 год аудиторних занять та 2,9 год самостійної роботи.</p>
<b>Очікувані результати навчання</b>	<p>У результаті вивчення цього курсу студент повинен <b>знати</b>:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• принципи обробки та графічного представлення експериментальних даних,</li> <li>• основні кристалографічні характеристики для опису структури,</li> <li>• можливості найпоширеніших фахових баз даних в галузі неорганічної хімії та матеріалознавства,</li> <li>• виклики масивів великих даних,</li> </ul> <p>та <b>вміти</b>:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• аналізувати зведені таблиці,</li> <li>• описувати закономірності математичними функціями,</li> <li>• створювати моделі кристалічних структур,</li> <li>• зображати проекції структур, будувати координаційні многогранники,</li> <li>• визначати умови утворення сполук, працювати з базами даних,</li> <li>• аналізувати дані, знаходити закономірності.</li> </ul> <p>У результаті успішного проходження курсу студент набуде <b>загальні компетентності</b>:</p> <p>ЗК1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу на основі логічних аргументів і перевірених фактів.</p> <p>ЗК2. Здатність вчитися впродовж життя і оволодівати сучасними знаннями.</p> <p>ЗК8. Навички в області застосування інформаційно-комунікаційних технологій (ІКТ) для обробки хімічних даних.</p> <p>ЗК14. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.</p> <p>та <b>спеціальні (фахові) компетентності</b>:</p> <p>СК2. Вміння застосовувати знання і розуміння для вирішення якісних та кількісних проблем відомої природи.</p> <p>СК6. Здатність до використання спеціального програмного забезпечення та моделювання в хімії.</p> <p><b>Програмні результати навчання:</b></p> <p>ПР32. Знання хімічної термінології та номенклатури, спроможність описувати хімічні дані у символічному вигляді.</p>

	<p>ПРУ3. Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.</p> <p>ПРУ4. Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.</p> <p>ПРУ9. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.</p> <p>ПРУ10. Здійснювати моніторинг та аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури.</p>																				
<b>Ключові слова</b>	Експериментальні дані, математичні функції, графічні залежності, бази даних, критичний аналіз, пошук закономірностей.																				
<b>Формат курсу</b>	Дистанційний (читання лекцій, консультування, залік) та очний (проведення лабораторних занять та консультацій).																				
<b>Теми</b>	Приведено у Таблиці 1.																				
<b>Підсумковий контроль, форма</b>	Залік в кінці семестру.																				
<b>Пререквізити</b>	Наявність повної загальної середньої освіти.																				
<b>Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу</b>	<p>Використання таких методів навчання:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- словесні – лекція, пояснення, бесіда;</li> <li>- наочні – ілюстрування лекційного матеріалу схемами, таблицями, графіками, моделями;</li> <li>- практичні – виконання лабораторних робіт (індивідуальні та групові завдання), спрямованих на застосування набутих знань у розв'язанні практичних завдань.</li> </ul>																				
<b>Необхідне обладнання</b>	Мультимедійне обладнання, персональні комп'ютери, фахові програми, бази кристалографічних даних.																				
<b>Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)</b>	<p>Упродовж семестру студенти мають два контрольні опитування та вісім лабораторних робіт, за якими перевіряються знання теоретичного матеріалу та вміння розв'язувати завдання, відповідно, а також два домашні завдання. У процесі навчання студенти повинні оволодіти всіма розділами програми. Питання програми, які не розглядались на лекціях студенти опрацьовують самостійно. Результати навчання студентів оцінюються за 100-бальною шкалою. Курс є одним модулем, оціненим у 100 балів. Студент, який отримав більше 50 балів, отримує залік.</p> <p style="text-align: center;"><b>Розподіл балів, які отримують студенти</b></p> <table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th>Види контролю</th> <th>Кількість</th> <th>Оцінювання</th> <th>Максимальна сума балів</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Виконання і захист лабораторної роботи</td> <td style="text-align: center;">8</td> <td style="text-align: center;">10</td> <td style="text-align: center;">80</td> </tr> <tr> <td>Контрольне опитування</td> <td style="text-align: center;">2</td> <td style="text-align: center;">5</td> <td style="text-align: center;">10</td> </tr> <tr> <td>Домашнє завдання</td> <td style="text-align: center;">2</td> <td style="text-align: center;">5</td> <td style="text-align: center;">10</td> </tr> <tr> <td><b>Разом</b></td> <td></td> <td></td> <td style="text-align: center;"><b>100</b></td> </tr> </tbody> </table> <p><b>Академічна доброчесність:</b> Очікується, що лабораторні та контрольні роботи студентів будуть їхніми оригінальними дослідженнями чи міркуваннями. Виявлення ознак академічної недоброчесності в письмовій роботі студента є підставою для її незарахування.</p>	Види контролю	Кількість	Оцінювання	Максимальна сума балів	Виконання і захист лабораторної роботи	8	10	80	Контрольне опитування	2	5	10	Домашнє завдання	2	5	10	<b>Разом</b>			<b>100</b>
Види контролю	Кількість	Оцінювання	Максимальна сума балів																		
Виконання і захист лабораторної роботи	8	10	80																		
Контрольне опитування	2	5	10																		
Домашнє завдання	2	5	10																		
<b>Разом</b>			<b>100</b>																		

	<p><b>Відвідання занять</b> є важливою складовою навчання. Очікується, що студенти відвідають усі лекції і лабораторні заняття дисципліни. Студенти зобов'язані дотримуватися усіх термінів, визначених для виконання усіх видів робіт.</p> <p><b>Політика виставлення балів:</b> враховуються бали, набрані на лабораторних заняттях.</p>
<b>Питання до заліку чи екзамену</b>	Перелік питань до контрольного опитування розміщений на сторінці дисципліни на платформі Moodle (e-learning.lnu.edu.ua).
<b>Опитування</b>	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості викладання дисципліни буде надано по завершенню курсу.

## Схема курсу

Тиж-день	Тема, план, короткі тези	Форма діяльності	Завдання, год	Термін виконання
1	Табличний процесор Excel	лекція лабораторна робота	2 год + 2 год самостійної роботи  Обробка та графічне представлення експериментальних даних (Excel); 2 год	1-й тиждень
2	Графічний редактор Origin	лекція лабораторна робота	2 год + 2 год самостійної роботи  Обробка та графічне представлення експериментальних даних (Origin); 2 год	2-й тиждень
3	Моделювання кристалічних структур і дифрактограм: PowderCell	лекція лабораторна робота	2 год + 4 год самостійної роботи  Створення моделей кристалічних структур та побудова теоретичних дифрактограм (PowderCell); 2 год	3-й тиждень
4, 5	Візуалізація структур: ATOMS	лекція лабораторна робота	4 год + 5 год самостійної роботи  Графічне представлення кристалічних структур і координаційних многогранників атомів (ATOMS); 4 год	4-, 5-й тиждень
6	Кристалохімічний аналіз: DIAMOND	лекція лабораторна робота контрольне опитування	2 год + 5 год самостійної роботи  Кристалохімічний аналіз структур (DIAMOND); 2 год	6-й тиждень
7, 8	Діаграми стану: PaulingFile, ASM Phase Diagram Database	лекція лабораторна робота	4 год + 4 год самостійної роботи  Визначення умов утворення сполук з діаграм стану систем (PaulingFile, ASM Phase Diagram Database); 4 год	7-, 8-й тиждень
9, 10	Кристалографічні характеристики неорганічних фаз: Pearson's CD, ISCD	лекція лабораторна робота	4 год + 4 год самостійної роботи  Аналіз кристалографічних характеристик, пошук закономірностей (Pearson's CD); 4 год	9-, 10-й тиждень
11	Кристалографічні характеристики комплексних сполук: CSD, PDB	лекція лабораторна робота	2 год + 4 год самостійної роботи  Аналіз кристалографічних характеристик, пошук закономірностей (ISCD); 2 год	11-й тиждень

12	Властивості матеріалів: SpringerMaterials	лекція лабораторна робота	2 год + 4 год самостійної роботи Пошук матеріалів за заданими властивостями (SpringerMaterials); 2 год	12-й тиждень
13	Інформаційні відомості у світі великих даних: IUCr Open Data	лекція лабораторна робота контрольне опитування	2 год + 4 год самостійної роботи Пошук кристалографічних параметрів за різними критеріями (CSD, PDB); робота з базами великих даних (IUCr Open Data); 2 год	13-й тиждень