



სასწავლო კურსის პროგრამა (სილაბუსი)

სასწავლო კურსის დასახელება

ქიმია კომპიუტერის დახმარებით
Computer Aided Chemistry

სასწავლო კურსის კოდი: CACHE04

პროგრამის დასახელება

ქიმიური და ბიოლოგიური ინჟინერია

აკადემიური უმაღლესი განათლების საფეხური

<input checked="" type="checkbox"/> ბაკალავრიატი <input type="checkbox"/> მაგისტრატურა <input type="checkbox"/> დოქტორანტურა
--

ავტორი

გვარი, სახელი:	ელიზბარაშვილი ელიზბარი
სამუშაო ადგილი:	საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი, ქიმიური და ბიოლოგიური ტექნოლოგიის დეპარტამენტი, კოსტავას 69, ოთახი 302
თანამდებობა:	სრული პროფესორი
ტელეფონი:	233-52-01 (შიდა ტელ: 6156)
ელ-ფოსტა:	elizbarashvili@gtu.ge

სასწავლო კურსის მიზანი

სასწავლო კურსის მიზანია იმ ძირითადი ქიმიური პროგრამების გამოყენების შესწავლა, რომელთა საშუალებითაც შესაძლებელია ქიმიური ინფორმაციის დამუშავება, ტექსტური დოკუმენტების რედაქტირება (მაგ. სტატიების, ქიმიური ლიტერატურის, პრეზენტაციების გაფორმება), მარტივი ქიმიური გაანგარიშებების (მოლეკულური მასის განსაზღვრა, კონცენტრაციის გათვლა და ა.შ.) შესრულება, მონაცემთა ბაზებში განთავსებულ ქიმიური ინფორმაციასთან მუშაობა, ექსპერიმენტის შედეგების მონაცემთა ბაზებში განთავსების ორგანიზება, მოლეკულათა გეომეტრიის გაანგარიშება, მოლეკულათა 3D-მოდელის აგება და ოპტიმიზაცია, მოლეკულათა ქიმიური და ფიზიკური თვისებების წინასწარმეტყველება.

კრედიტების რაოდენობა: 6

საათების განაწილება სტუდენტის დატვირთვის შესაბამისად (კვირა/სემესტრი)

ლექცია:	3/45
სემინარი (ჯგუფში მუშაობა):	
პრაქტიკული:	
ლაბორატორიული სამუშაო:	2/30
საკურსო სამუშაო/პროექტი:	
პრაქტიკა:	
დამოუკიდებელი სამუშაო:	87

დაშვების წინაპირობები

ორგანული ქიმია, არაორგანული ქიმია.

სწავლის შედეგები

სასწავლო კურსის ათვისების შემდეგ სტუდენტი შეძლებს მის წინაშე არსებული ქიმიური პრობლემის გადაწყვეტას კომპიუტერის საშუალებით, კერძოდ:

- ✓ ქიმიური ფორმულების შემცველი ტექსტური დოკუმენტებისა და პრეზენტაციების გაფორმებას;
- ✓ მარტივი ქიმიური გაანგარიშებების (მაგ. კონცენტრაციის, მოლეკულური მასის და ა.შ. გამოთვლა) შესრულებას;
- ✓ საერთაშორისო სამიზნე სისტემებიდან ნაერთებისა და სხვა ტიპის ქიმიური ინფორმაციის მოძიებასა და დამუშავებას;
- ✓ ექსპერიმენტით მიღებული შედეგების მონაცემთა ბაზებში განთავსებას;
- ✓ რთული მოლეკულების სამგანზომილებიანი მოდელების აგებას;
- ✓ მოლეკულათა ფიზიკური და ქიმიური თვისებების გაანგარიშებას.

განივითარებს შემდეგ კომპეტენტურობებს:

- 1. ცოდნა და გაცნობიერება** - კომპიუტერული პროგრამების გამოყენების შესაძლებლობის ცოდნა ქიმიისა და ქიმიური ტექნოლოგიის ამოცანების გადაჭრაში და ციფრული ტექნიკის როლის გაცნობიერება ქიმიის თანამედროვე ამოცანების გადაჭრაში
- 2. ცოდნის პრაქტიკაში გამოყენების უნარი** - ქიმიური ამოცანის გადაჭრისათვის შესაბამისი პროგრამული უზრუნველყოფის შერჩევა და ამოცანის შესრულება
- 3. დასკვნის უნარი** - კომპიუტერული გაანგარიშებებით მიღებული მონაცემების ანალიზი და მიღებულ შედეგებზე გაყრდნობით დასკვნის გაკეთების უნარი
- 4. სწავლის უნარი** - ათვისებული პროგრამული უზრუნველყოფების დამატებითი შესაძლებლობების დამოუკიდებლად ათვისება, პროგრამული უზრუნველყოფების ახალი ვერსიების დამტკიცებული ფუნქციების დამოუკიდებლად შესწავლა.

შინაარსი

ლექცია	
N	თემის დასახელება და შინაარსი
1	შესავალი. ქიმიური პროგრამული უზრუნველყოფა. კლასიფიკაცია, დანიშნულება, გამოყენება.
2	საოფისე პროგრამები (MS Word, MS Excel) და ქიმიური ინფორმაცია. ქიმიური ფორმულების რედაქტირება MS Word-ის სტანდარტული ფუნქციებითა და სპეციალური მაკროსებით. მარტივი გაანგარიშებების შესრულება.

3	საცნობარო პროგრამები (ნაწ. 1). ელემენტთა პერიოდულობის ცხრილის ელექტრონული ელექტრონული ლოკალური და ვებ რესურსები.
4	საცნობარო პროგრამები (ნაწ. 2). ლიტერატურისა და ქიმიური ინფორმაციის ძიების ვებ-ტექნოლოგიები. ეფექტური ძიების მეთოდები და საშუალებები. ქიმიური ინფორმაციის ძირითადი ვებ-სერვერები
5	მოლეკულების ორგანოზომილებიანი მოდელების აგება. ქიმიური (სტრუქტურული) 2D-გრაფიკული რედაქტორები. სტრუქტურების აგება პროგრამის ChemSketch საშუალებით. მოდელების აგების ძირითადი ინსტრუმენტები (ელემენტი, ბმა), ნახშირბადოვანი ჩონჩხის აგება, ჰეტეროელემენტებისა და ფუნქციური ჯგუფების ჩანაცვლება, მარტივი და ჯერადი ბმების აგება, კოორდინაციული ბმების აგება, სტრუქტურის აგება დასახელების მიხედვით. მოდელების შენახვა და ექპორტირება
6	მოლეკულების ორგანოზომილებიანი მოდელების აგება. ქიმიური (სტრუქტურული) 2D-გრაფიკული რედაქტორები. სტრუქტურების აგება პროგრამების ChemDraw და ISIS Draw საშუალებით.
7	ტრანსფორმაციები მოლეკულების ორგანოზომილებიანი მოდელებზე პროგრამის ChemSketch საშუალებით. მოლეკულის გარდასახვა ღერძების მიმართ, მოლეკულის სივრცეში შემობრუნება, გამოსახვის ფორმების ვარირება.
8	ტრანსფორმაციები მოლეკულების ორგანოზომილებიანი მოდელებზე პროგრამის ChemDraw საშუალებით. მოლეკულის გარდასახვა ღერძების მიმართ, მოლეკულის სივრცეში შემობრუნება, გამოსახვის ფორმების ვარირება.
9	IUPAC-ის ნომენკლატურა. ნაერთების ნომენკლატურა IUPAC-ის მიხედვით კომპიუტერული პროგრამების გამოყენებით. ნაერთების დასახელება საერთაშორისო ნომენკლატურის მიხედვით, სტრუქტურული ფორმულების აგება დასახელების მიხედვით.
10	სპექტრული ანალიზი. ნაერთების სპექტრული ანალიზი და გრაფიკების (სპექტრების) დამუშავება კომპიუტერის საშუალებით. ინტერპოლირება, გრაფიკის აგება, შთანთქმის მაქსიმუმების განსაზღვრა, პიკის ფართობის გამოთვლა.
11	შედეგების ორგანიზება ექსპერიმენტის შედეგების ორგანიზება მონაცემთა ბაზების სახით. მონაცემთა ბაზების შექმნა, ინფორმაციის შენახვა, კლასიფიცირება, ანგარიშის (რეპორტის) მომზადება.
12	მარტივი გაანგარიშებები მოლეკულური მასის, შემადგენლობის, ხსნარების კონცენტრაციის, სტექიომეტრიული კოეფიციენტებისა და ა.შ გაანგარიშება.
13	მოლეკულების მოდელირება მოლეკულების სამგანზომილებიანი მოდელების აგება, გეომერიული ოპტიმიზაცია ოპტიმიზაციის მეთოდები, ოპტიმიზაციის სანდოობა.
14	რთული გაანგარიშებები მოლეკულებზე. ნაერთების ქიმიური და ფიზიკური თვისებების გაანგარიშება. გაანგარიშების მათემატიკური აპარატი. გაანგარიშების შედეგების სანდოობა.
15	რთული გაანგარიშებები მოლეკულებზე. ნაერთების ქვანტურ-ქიმიური და მოლეკულური მექანიკის გაანგარიშების საფუძვლები და თანამედროვე საშუალებები. AM1 და MM მეთოდები. პარამეტრიზაცია. ოპტიმიზაცია.

ლაბორატორიული	
N	თემის დასახელება და შინაარსი
1	ქიმიური პროგრამული უზრუნველყოფა. კლასიფიკაცია, დანიშნულება, გამოყენება. პროგრამების Table, ChemSketch, ChemOffice, ChemAssitant, Convertor შესაძლებლობის დემონსტირება.
2	ქიმიური ფორმულების რედაქტირება MS Word-ის სტანდარტული ფუნქციებითა და სპეციალური მაკროსებით. მარტივი გაანგარიშებების შესრულება MS Excel-ის საშუალებით - ქიმიურ ექსპერიმენტში გამოყენებული რეაგენტების რაოდენობის გადაანგარიშება, თეორიული და პრაქტიკული გამოსავლიანობის გაანგარიშება.
3	საცნობარო პროგრამები (ელემენტი პერიოდულობის ცხრილის ელექტრონული ელექტრონული ლოკალური და ვებ რესურსები.
4	ლიტერატურისა და ქიმიური ინფორმაციის ძიება ვებ-ტექნოლოგიების გამოყენებით
5	2D-გრაფიკული სტრუქტურების აგება პროგრამის ChemSketch საშუალებით. პროგრამის აღწერილობა. მოდელის აგების ძირითადი ინსტრუმენტები (ელემენტი, ბმა), ნახშირბადოვანი ჩონჩხის აგება, ჰეტეროელემენტებისა და ფუნქციური ჯგუფების ჩანაცვლება, მარტივი და ჯერადი ბმების აგება, კოორდინაციული ბმების აგება, სტრუქტურის აგება დასახელების მიხედვით. მოდელის შენახვა და ექპორტირება.
6	2D-გრაფიკული სტრუქტურების აგება პროგრამების ChemDraw და ISIS Draw საშუალებით. პროგრამის აღწერილობა. მოდელის აგების ძირითადი ინსტრუმენტები (ელემენტი, ბმა), ნახშირბადოვანი ჩონჩხის აგება, ჰეტეროელემენტებისა და ფუნქციური ჯგუფების ჩანაცვლება, მარტივი და ჯერადი ბმების აგება, კოორდინაციული ბმების აგება, სტრუქტურის აგება დასახელების მიხედვით. მოდელის შენახვა და ექპორტირება.
7	ტრანსფორმაციები მოლეკულების ორგანოზომილებიან მოდელებზე პროგრამის ChemSketch საშუალებით. • XY-გადაადგილება ; • XY-ტრანსფორმაცია; • XYZ-ტრანსფორმაცია; სტრუქტურის გადატანა ტექსტური რედაქტორებში. ბეჭდვა. ექპორტირება.
8	ტრანსფორმაციები მოლეკულების ორგანოზომილებიან მოდელებზე პროგრამის ChemDraw საშუალებით. • XY-გადაადგილება ; • XY-ტრანსფორმაცია; • XYZ-ტრანსფორმაცია; სტრუქტურის გადატანა ტექსტური რედაქტორებში. ბეჭდვა. ექპორტირება.
9	ნაერთების ნომენკლატურა IUPAC-ის მიხედვით კომპიუტერული პროგრამების გამოყენებით. ნაერთების დასახელება საერთაშორისო ნომენკლატურის მიხედვით, სტრუქტურული ფორმულების აგება დასახელების მიხედვით.
10	სპექტრული ანალიზი. ნაერთების სპექტრული ანალიზი და გრაფიკების (სპექტრების) დამუშავება კომპიუტერის საშუალებით. ინტერპოლირება, გრაფიკის აგება, შთანთქმის მაქსიმუმების განსაზღვრა, პიკის ფართობის გამოთვლა.
11	შედეგების ორგანიზება ექსპერიმენტის შედეგების ორგანიზება მონაცემთა ბაზების სახით. მონაცემთა ბაზების შექმნა, ინფორმაციის შენახვა, კლასიფიცირება, ანგარიშის (რეპორტის) მომზადება.
12	მარტივი ქიმიური გაანგარიშებების შესრულება. მოლეკულური მასის, შემადგენლობის, ხსნარების კონცენტრაციის, სტექიომეტრიული კოეფიციენტებისა და ა.შ გაანგარიშება.
13	მოლეკულების სამგანზომილებიანი მოდელების აგება, გეომერიული ოპტიმიზაცია. ბმებს შორის მანძილის განსაზღვრა, ბმის კოთხის განსაზღვრა, ტორსული კუთხის განსაზღვრა, ატომებს შორის დისტანციის დადგენა.
14	რთული გაანგარიშებები მოლეკულებზე. ნაერთების ქიმიური და ფიზიკური თვისებების გაანგარიშება.

	განგარიშების მათემატიკური აპარატი. განგარიშების შედეგების სანდოობა.
15	რთული განგარიშებები მოლეკულებზე. ნაერთების ქვანტურ-ქიმიური და მოლეკულური მექანიკის განგარიშების საფუძვლები და თანამედროვე საშუალებები. AM1 და MM მეთოდები. პარამეტრიზაცია. ოპტიმიზაცია.

სწავლის შედეგების მიღწევის ფორმები და მეთოდები

ლექცია სემინარი (ჯგუფში მუშაობა) პრაქტიკული ლაბორატორიული პრაქტიკა
 საკურსო სამუშაო/პროექტი დამოუკიდებელი მუშაობა

სწავლების მეთოდები:

დისკუსია/დებატები; პრეზენტაციები; ლაბორატორიული დავალებები;

ამ მეთოდების განმარტებები თან ერთვის საგანმანათლებლო პროგრამას, აგრეთვე განთავსებულია უნივერსიტეტის ვებ-გვერდზე <http://www.gtu.ge/quality/pdf/sc.pdf>.

სტუდენტის ცოდნის შეფასების სისტემა

ქვემოთ მოყვანილი შეფასების ფორმების შესაბამისი მეთოდების, კრიტერიუმებისა და სკალების აღწერა დამტკიცებულია უნივერსიტეტის აკადემიური საბჭოს 2012 წლის 6 ივლისის № 732 დადგენილებით, რომელიც თან ერთვის საგანმანათლებლო პროგრამას, აგრეთვე განთავსებულია უნივერსიტეტის ვებ-გვერდზე <http://www.gtu.ge/quality/axali/shefasesbisforma.pdf>.

შეფასება ხდება 100 ქულიანი სკალით.

დადებით შეფასებად ჩაითვლება:

- (A) - ფრიადი - მაქსიმალური შეფასების 91% და მეტი;
- (B) - ძალიან კარგი - მაქსიმალური შეფასების 81-90%;
- (C) - კარგი - მაქსიმალური შეფასების 71-80%;
- (D) - დამაკმაყოფილებელი - მაქსიმალური შეფასების 61-70%;
- (E) - საკმარისი - მაქსიმალური შეფასების 51-60%;

უარყოფით შეფასებად ჩაითვლება:

- (FX) - ვერ ჩააბარა - მაქსიმალური შეფასების 41-50%, რაც ნიშნავს, რომ სტუდენტს ჩასაბარებლად მეტი მუშაობა სჭირდება და ეძლევა დამოუკიდებელი მუშაობით დამატებით გამოცდაზე ერთხელ გასვლის უფლება.
- (F) - ჩაიჭრა - მაქსიმალური შეფასების 40% და ნაკლები, რაც ნიშნავს, რომ სტუდენტის მიერ ჩატარებული სამუშაო არ არის საკმარისი და მას საგანი ახლიდან აქვს შესასწავლი.

შეფასების ფორმები:

- ყოველკვირეული შეფასება;
- შუალედური შეფასება;
- დასკვნითი გამოცდა.

შეფასების მეთოდები:

- ტესტირება;
- ზეპირი გამოკითხვა;
- წერითი დავალება;
- ჯგუფური/ინდივიდუალური პროექტის პრეზენტაცია;
- დაკვირვება.

ძირითადი ლიტერატურა

1. ელიზბარაშვილი ე., გვასალია ლ. ქიმია და პერსონალური კომპიუტერი. თბილისი: 2005, ტექნიკური უნივერსიტეტი. -174 გვ
http://www.gtu.edu.ge/katedrebi/dep33/eliz/lectures/Book_ChemSofts_Final.pdf

დამხმარე ლიტერატურა

2. ACD/ChemSketch 5.0. User Manual. Comprehensive Interface Description.
3. ChemDraw. Chemical Structure Drawing Standard.

სილაბუსის ავტორი

ელიზბარ ელიზბარაშვილი

ფაკულტეტის ხარისხის უზრუნველყოფის
სამსახურის უფროსი

მამუკა მაისურაძე

საგანმანათლებლო პროგრამის ხელმძღვანელი

ნაზიბროლა კუციავა

მიღებულია

ქიმიური ტექნოლოგიისა და მეტალურგიის
ფაკულტეტის საბჭოს სხდომაზე
„_13_“ _მაისი_____ 2011 წ

ფაკულტეტის საბჭოს თავმჯდომარე

ნუგზარ წერეთელი

შეთანხმებულია

სტუ-ს ხარისხის უზრუნველყოფის სამსახურთან
„___“ _____ 2011 წ

გიორგი ძიძიგური