

Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	Zastosowanie informatyki w chemii
Kierunek:	Chemia, I stopień [6 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2012
Specjalność:	chemia kryminalistyczna
Rok/Semestr:	I/2
Liczba godzin:	30,0
Nauczyciel:	Borówko Małgorzata, prof. dr hab.
Forma zajęć:	laboratorium
Rodzaj zaliczenia:	zaliczenie na ocenę
Poziom trudności:	podstawowy
Wstępne wymagania:	Brak
Metody dydaktyczne:	<ul style="list-style-type: none">• ćwiczenia laboratoryjne

<p>Zakres tematów:</p>	<p>Część I - Tematy:</p> <ol style="list-style-type: none"> Podstawy obsługi komputera: <ul style="list-style-type: none"> włączanie, startowanie systemu, obsługa myszy i klawiatury, pulpit, obiekty, wygląd, zachowanie i właściwości, dostosowywanie systemu do własnych potrzeb, pliki i katalogi, operacje na plikach i katalogach. Edytor tekstu MS Word: <ul style="list-style-type: none"> podstawowe informacje o programie, metody redagowania tekstu, formatowanie tekstu, korespondencja seryjna, tworzenie i formatowanie tabel, wstawianie obiektów do dokumentu, kopiowanie i wklejanie z wykorzystaniem schowka systemowego, wprowadzanie wzorów matematycznych w dokumencie, przygotowywanie dokumentów do druku, układ strony, nagłówek i stopka. Arkusze kalkulacyjne MS Excel <ul style="list-style-type: none"> podstawowe informacje o programie, wprowadzanie, formatowanie i modyfikacja danych w arkuszu, obliczenia według zadanego wzoru z wykorzystaniem wbudowanych funkcji, sporządzanie i formatowanie wykresów, dodawanie i usuwanie serii danych, przygotowywanie i formatowanie arkuszy do druku. Program MS Power Point <ul style="list-style-type: none"> podstawowe informacje o programie, zasady tworzenia prezentacji graficznych, cechy dobrej prezentacji, wstawianie obiektów do slajdów, zmiana szaty graficznej prezentacji. Samodzielne tworzenie Autoprezentacji, interaktywny dokument multimedialny: definiowanie i posługiwanie się przyciskami akcji oraz hiperłączami publikowanie prezentacji. Program do pisania wzorów chemicznych ChemSketch <ul style="list-style-type: none"> podstawowe informacje o programie, wstawianie i zamiana elementów strukturalnego związku chemicznego, tryb Draw i Structure, zmiana typu wiązań pomiędzy pierwiastkami w strukturze, wykorzystanie istniejących baz związków do tworzenia nowych, tworzenie równań reakcji chemicznych, dodawanie elementów symboli reakcyjnych, dodawanie podpisów do związków oraz automatyczne ich nazewnictwo, wizualizacja 3D przygotowanych wzorów związków, przygotowanie i formatowanie dokumentu do druku. Bazy danych SCI-Ex, SSCI i AHCI (Web of Science) - wyszukiwanie informacji według osoby i według tematu. <p>Część II</p> <p>W ramach ćwiczeń student pisze programy o wzrastającym stopniu złożoności. Zadania dostosowane są do kolejno realizowanych tematów.</p> <p>Tematy:</p> <ol style="list-style-type: none"> Edycja, kompilacja, uruchamianie programów. Standardowe wejście i wyjście. Wczytywanie i wyprowadzanie wartości zmiennych różnych typów. Planowanie wydruków. Lista argumentów wyjściowych procedur Write i WriteLn . Tworzenie wyrażeń. Podstawowe instrukcje (instrukcja przypisania, instrukcja wywołania procedury, instrukcja złożona). Instrukcje warunkowe 'if' oraz 'case'. Pętle: 'while', 'for', 'repeat ... until'. Przykłady zastosowań. Zmienne tablicowe. Obsługa plików. Zapisywanie do pliku, czytanie z pliku. Tablicowanie funkcji. Podprogramy: funkcje, procedury. Mechanizmy komunikacji z podprogramem: zmienne globalne, funkcyjne zwracanie wartości, parametry przekazywane przez wartość, parametry przekazywane przez zmienną. Całkowanie numeryczne (metoda trapezów, metoda Simpsona). Rozwiązywanie równań nieliniowych (metoda bisekcji, metoda Newtona). Metody aproksymacji (regresja liniowa). Przykłady zastosowań w chemii.
<p>Forma oceniania:</p>	<ul style="list-style-type: none"> ćwiczenia praktyczne/laboratoryjne ocena ciągła (bieżące przygotowanie do zajęć i aktywność)

Literatura:	<ol style="list-style-type: none">1. Powszechnie dostępne podręczniki dotyczące MS Word, MS Excel, MS PowerPoint oraz MS Windows.2. A. Marciniak, Turbo Pascal 5.5, BUM, Wydawnictwo Nakom, Poznań, 1993.3. A. Marciniak, Turbo Pascal 7, BUM, Wydawnictwo Nakom, Poznań, 2002.4. M. Sysło, Elementy informatyki w szkole, PWN, Warszawa, 1993.5. Z. Fortuna, B. Macukow, J. Wąsowski, Metody numeryczne, WNT, Warszawa, 2001
Dodatkowe informacje:	