

A tantárgy neve:	magyarul:	Kémiai informatikai alapok						Kódja:	TTKKG0901	
	angolul:	Basic Chemical Informatics								
A képzés 1. féléve										
Felelős oktatási egység:		DE TTK, Kémiai Intézet								
Kötelező előtanulmány neve:		Nincs						Kódja:		
Típus		Heti óraszámok						Követelmény	Kredit	Oktatás nyelve
		Előadás		Gyakorlat		Labor				
Nappali	X	Heti	0	Heti	2	Heti	0	gyakorlati jegy	2	magyar
Levelező		Féléves		Féléves		Féléves				
Tantárgyfelelős oktató		neve:		Dr. Mándi Attila				beosztása:	egyetemi adjunktus	
A kurzus célja, hogy a hallgatók										
<p>áttekintsék, átismételjék és kiegészítsék alapvető informatikai ismereteiket, megismerjék az office rendszerek kémiai alkalmazhatóságát, valamint további egyszerűbb kémiai alkalmazásokat, természettudományos és kémiai programcsomagokat.</p>										
Tanulás eredmények, kompetenciák: a hallgató										
<i>Tudás:</i>										
Alkalmazható tudással rendelkezik az informatika / számítógép-tudomány alapfogalmairól, a kémia és általában az egzakt természettudomány tanulásához, műveléséhez és prezentálásához szükséges egyszerűbb programcsomagokról.										
Rendelkezik azokkal az ismeretekkel, amelyek (megfelelő szakmai irányítással) lehetővé teszik számára a vizsgálható kémiai folyamatok, rendszerek, tudományos problémák tudományos gyakorlatban elfogadott módszerekkel történő tesztelését, a mérési eredmények számítógépes feldolgozását.										
<i>Képesség:</i>										
Képes egy adott kémiai problémát informatikai / számítógép-tudományi módszerekkel megoldani, a legmegfelelőbb módszert kiválasztani. Képes a szövegszerkesztési normák figyelembevételével szöveges dokumentumot létrehozni. Képes mérési / számítási eredmények ábrázolására, alapvető kiértékelésre. Képes kémiai témák átlátható, lényegretörő prezentációját megalkotni. Képes szerkezeti képletek, reakcióegyenletek képletrajzolással történő reprodukálására. Képes egyszerű kereséseket végrehajtani kémiai adatbázisokban.										
Képes a mérési eredmények kiértékelésére, értelmezésére, dokumentálására.										
<i>Attitűd:</i>										
Nyitott a számítógép alkalmazására kémiai problémák megoldása, dokumentálása és az eredmények feldolgozása során. Nyitott szakmai eszmecserére a feladatok megoldása érdekében.										
Nyitott a szakmai eszmecserére mind a kémiai szakterületen, mind a kapcsolódó területeken dolgozó szakemberekkel.										
<i>Autonómia és felelősség:</i>										
önállóan alkalmazza a számítógépes módszereket kísérleti és számítási eredmények feldolgozására, adatok kiszámolására, kémiai szerkezetek rajzolására, beszámolók, dolgozatok stb. írására kémiai tárgykörben. Felelősséget vállal a számításai eredményeiért, az előállított dokumentumok megfelelő formátumáért. Saját munkájának eredményét hasonló szakmai beosztásban dolgozó munkatársak (hallgatók) eredményeivel összeveti.										
A kurzus tartalma, témakörei										
<ul style="list-style-type: none"> – Szakmai szövegszerkesztés. – Táblázatkezelő programok kémiai felhasználása. – Szakmai prezentáció készítés. – Kémiai rajzolóprogramok. – Kémiai adatbázis-kezelés. 										
Tervezett tanulási tevékenységek, tanítási módszerek										
<ul style="list-style-type: none"> – Aktív részvétel az órákon. – A megoldandó feladatok frontális magyarázata. – Önálló munka a számítógéppel, tanári segítség mellett. – Internetes források bevonása, amennyiben szükséges. – Egyéni esetfeldolgozások elkészítése (egyeztetett témában és időpontban). 										

Értékelés

Órai munka (33 %)

Évközi vizsgafeladatok (67 %)

A géptermi gyakorlatok látogatása kötelező. A félév során maximum 3 hiányzás engedélyezett, melyből 2 orvosi igazoláshoz kötött. A hiányzások nem mentesítik a hallgatót a számonkérések teljesítése alól.

5 vizsgafeladat az MS Word, MS PowerPoint, MS Excel, kémiai rajzolóprogram és kémiai adatbázisok témakörökben a tematika szerinti heteken. A számonkérések hiányzás esetén sem mellőzhetők, a későbbi órákon teljesítendőek.

Kötelező olvasmány:

<https://support.office.com/hu-hu>

Ajánlott szakirodalom:

- Katona Endre: Bevezetés az informatikába, Panem, Budapest 2004.
- Czenky Márta, Tamás Péter, Vágási János: Tanuljunk együtt az informatikát, ECDL elméleti modul, ComputerBooks, Budapest 2004.
- C. Bunks: Egy korty GIMP, A digitális képszerkesztés hatékony módszerei, Typotex, Budapest 2002.

Heti bontott tematika

1. hét	MS Word. Szakmai szöveg másolása, szerkesztése. Formázás, alsó és felső index használata, görög betűk. TE: A hallgató képes vegyjeleket, kémiai összegképleteket, görög betűket tartalmazó kémiai szakszövegeket számítógépen reprodukálni és szerkeszteni.
2. hét	Szövegszerkesztő képletírójának használata, képletek, egyenletek. Táblázatrajzolás, formázás. Cellák összevonása, szegély és mintázat. TE: A hallgató matematikai jellegű képleteket és táblázatokat tud beszúrni a kémiai szakszövegbe. A táblázatokat az igényeknek megfelelő változatos formában képes előállítani.
3. hét	Fejléc, lábléc, hasábok, hivatkozások, tartalomjegyzék használata szakmai szövegben. TE: A hallgató megtanulja a tudományos / műszaki jelentésekben, dolgozatokban előforduló fejlett formázási módszerekkel tagolni a dokumentumát, megismerkedik a hivatkozás fogalmával és beépítésével a szövegbe. Képes a szövegszerkesztővel tartalomjegyzéket előállítani és beszúrni a szövegbe.
4. hét	Fedőlap, oldalszámok. Word dolgozat elkészítése. TE: A hallgató képes korábban létrehozott dokumentumokból (korábbi saját munkái) egy rendszerezett szakmai dolgozatot elkészíteni.
5. hét	MS Power Point. Szakmai bemutató készítése. TE: A hallgató képes megadott szakmai témából egyszerű szakmai prezentáció elkészítésére.
6. hét	Power Point: alakzatok, csoportok, animáció. Dolgozat. TE: A hallgató önállóan képes szabadon választott szakmai témából egyszerűen kezelhető, átlátható, igényes bemutató elkészítésére.
7. hét	MS Excel. Adatok közvetlen bevitele, automatikus kiegészítés, alapl műveletek, függvények, egyszerű diagramok készítése.

	TE: A hallgató képes táblázatkezelőbe történő közvetlen adatbevitelre, a táblázatkezelő alapvető funkcióinak használatára, matematikai alpműveletek végzésére, mértékegység-átváltásra, adatok oszlop- és kördiagramon történő ábrázolására.
8. hét	xy diagramok készítése. Diagram formázása. Véletlenszám-generátor. Adatok beolvasása fájlból. Beépített függvények alkalmazása.
	TE: A hallgató képes xy diagramok létrehozására, formázására, beépített függvények használatára és adatok beolvasására szöveges állományból.
9. hét	Excel dolgozat I. Adatok ábrázolása egyszerű diagramon. Adatok ábrázolása xy diagramon.
	TE: A hallgató önállóan képes egyszerű műveletek elvégzésére, valamint az adatok / eredmények ábrázolására táblázatkezelő programban.
10. hét	Bonyolultabb cellaműveletek. Bonyolultabb képletek. xy diagramok alkalmazása egyenletek grafikus megoldására.
	TE: A hallgató képes bonyolultabb képletek táblázatkezelőben történő alkalmazására, másik fülben lévő adatokra történő hivatkozásra, egyenletek grafikus megoldására xy diagramok segítségével.
11. hét	Excel dolgozat II. Bonyolultabb kémiai képlet alapján történő számolás és az eredmény ábrázolása xy diagramon.
	TE: A hallgató önállóan képes bonyolultabb képletek táblázatkezelőben történő alkalmazására, az adatok és eredmények szakmailag megfelelő ábrázolására (tengelyek elnevezése, mértékegységek feltüntetése).
12. hét	Kémiai rajzolóprogram használata. Egyszerű és bonyolultabb szerkezeti képletek, egyenletek rajzolása, generálása. Egyéb funkciók használata (pl. móltömeg vagy összegképlet számítása).
	TE: A hallgató képes képletrajzoló programmal szerkezeti képletek, egyenletek reprodukálására, összegképlet és móltömeg számítására, tudományos és köznapi név alapján történő szerkezet generálásra. A hallgató képes angol nyelvű szoftverkörnyezetben felismerni az alapvető funkciókat.
13. hét	Kémiai rajzolóprogram dolgozat. Képletek/egyenletek rajzolása, generálása és alpműveletek végzése.
	TE: A hallgató önállóan képes képletrajzoló programmal szerkezeti képletek, egyenletek reprodukálására, összegképlet és móltömeg számítására, tudományos és köznapi név alapján történő szerkezet generálásra.
14. hét	Kémiai adatbázisok. Egyszerű és kombinált keresés, keresés képlet alapján.
	TE: A hallgató bevezető jelleggel megismer néhány kémiai adatbázis-kezelő programot, amelyre később további stúdiumok építhetők. Képes alapvető keresések végrehajtására (pl. szerző, vegyület neve, képlete alapján).