**СИЛЛАБУС**

 **2021-2022 оқу жылының көктемгі семестрі**

 **«6В07101 -Химия» білім беру бағдарламасы**

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Дисциплина коды** | **Дисциплина атауы** | **Студенттің өздік жұмысы (СӨЖ)** | **Сағат саны** | **Кредит саны**  | **Студентт****ің****оқытуш****ымен****өздік****жұмысы****(СОӨЖ)** |
| **Лекциялар (Л)** | **Практикалық сабақтар (ПЗ)** | **Лабораториялық жұмыстар (ЛЖ)** |
| S V 3 2 1 4 | Зат құрылысы | **97** | **20** | **10** | **20** | **6** | **6** |
| **Курстың академиялық мәліметтері** |
| **Оқыту түрі** | **Курс түрі** | **Лекция түрі** | **Практикалық сабақтың түрі** | **СӨЖ саны** | **Қорытынды бақылау формасы** |
| Онлайн/асинхронды | аралас | Проблемалық, аналитикалық шолу | Есеп шығаруЕсептеуді компьютерлік бағдарламаның көмегімен орындау | 3 | Жазбаша түрдегі экзамен |
| **Лектор** | **К.х.н.доцент Жусупова А.К.** |  |
| **e-mail** | zh.aisulu@mail.ru |
| **Телефоны**  | 87714544005 |

|  |
| --- |
| **Курстың академиялық презентациясы** |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **Дисциплина мақсаты** | **Оқытудан күтілетін нәтиже (ОН)**Дисциплина нәтижесінде студент: | **Жетістік индикаторы (ЖИ)**(әр ЖИ-не 2 индикатордан кем емес) |
| молекулалардың құрылымы және химиялық байланыстар табиғаты, молекулалардың энергетикалық күйлері және молекулалық спектроскопия теориясының негіздері туралы түсінік беру. | ОН1. Симметрия теориясының негізгі ережелері мен заңдарының мазмұнын түсіндіру. | ЖИ 1.1 Молекулалардың құрылымын бағалаудың анықтамалары мен терминдеріне меңгереді;ЖИ 1.2 Гиллеспидің ЛЖЭТтежелуінің негізгі ережелерін тұжырымдайды.;ЖИ 1.3 Негізгі элементтер анықтамаларымен және симметрия операцияларымен жұмыс істейді.ЖИ 1.4 Нүктелік симметрия топтары бойынша жіктеу жүзеге асырадыЖИ 1.5 Келтірілмеген және келтірілмеген тұжырымдарды сипаттайды.  |
| ОН2. Молекулалық спектроскопия теориясы және кванттық механика теориясы негізінде молекулалардың энергетикалық күйлерін есептеу. | ЖИ 2.1 Заттардың және оларды құрайтын химиялық бөлшектердің энергетикалық сипаттамаларын есептеу үшін қажетті деректерді анықтайды;ЖИ.2.2 Жеке энергетикалық деңгейлер арасындағы ауысулар, энергия мен интенсивтілікті таңдау ережелері және спектрлік құрылымдарды таңдай алады.ЖИ 3 Молекулалардың құрылымымен спектрлік сипаттамалардың байланысын анықтайдыЖИ 4 Әр түрлі спектроскопия түрлерін - электрондық, тербелмелі, айналмалы типтердің параметрлерін есептеу үшін теңдеуді және оның формасын таңдайды.ЖИ 5 Молекулалық жүйелерді кванттық механикалық сипаттаудың негізгі принциптерін негіздейді.ЖИ 6 Еркін молекула үшін Шредингердің стационарлық теңдеуін сипаттайды. |
| ОН3. Молекулалық параметрлерді есептеу үшін химиялық байланыс теориясының және молекулалардың электронды құрылымының негізгі әдістерін қолдану. | ЖИ 3.1. Атом мүшелерінің, микростаттардың бөлінуін есептеу;ЖИ 3.2 Кристалл өрісінің тұрақтану энергиясын есептеу үшін кристалдық өріс теориясын қолдану; ЖИ 3.3. Әр түрлі электрондық dn-конфигурациялары үшін әлсіз кристалл өрісіндегі атомдық термдердің бөлінуіне топтық теорияны қолдану;ЖИ 3.4. Жоғары және төмен спинді күйлерді бағалау. |
| ОН4. Қолданбалы кванттық химияны қолдана отырып, химиялық байланыс, молекулалық орбитальдар теориясын талдау; | ЖИ 4 1. Хюккельдің қарапайым MO әдісімен кванттық-химиялық есептеулер жүргізу;ЖИ 4.2. Топтық теорияны қолдана отырып цис-бутадиен мен этиленнің МО-ын есептеу;ЖИ.4.3. Байланыс ретін, атомдар зарядын, еркін валенттілік индексін есептеу.ЖИ 4.4. MO әдісімен атомдық орбитальдардағы коэффициенттерді этилен мен бутадиенге есептеу. |
| **Пререквизиттер** | кристаллохимия, кванттық химия, физика, математика.  |
| **Постреквизиттер** | Зерттеудін физикалық әдістер, Кординациялық қосылыстар химиясы, Органикалық молекулардың стереохимиясы |
| **Әдебиеттер және ресурстар** | **Негізгі әдебиеттер**1. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев P.M. Теория строения молекул. М.: Высшая школа. 1979. 407 с.; Ростов-на-Дону: Феникс, 1997. 560 с.
2. Краснов К.Л. Молекулы и химическая связь. М.: Высшая школа. 1984. 295 с.
3. Краснов К.С. Физическая химия. Кн.1. Строение вещества. Термодинамика. М.:ВШ. 1995. 512 с.
4. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия. М: ВШ. 1988. 456 с.
5. Драго Р. Физические методы в химии. Т.1.М.: Мир. 1981. 422 с.
6. Каретников Г.С., Кудряшев И.В. Сборник примеров и задач по физической химии. М.: Высшая школа. 1995. 383 с.

Қосымша әдебиет1. Маррел Д., Кеттл С., Теддер Д. "Теория валентности” М, Мир, 1982.
2. Яцимирский К.Б., Яцимирский В.К. Химическая связь. Киев. Высшая школа, 1975.
3. Мальцев А. А. "Молекулярная спектроскопия".М.,изд. МГУ,1980.
4. Бенуэлл К. “Основы молекулярной спектроскопии” М., Мир,1985.
5. Бахшиев Н.Г. Введение в молекулярную спектроскопию.-Л.: ЛГУ, 1974, 216 с.
6. Мардошов Ю.С., Миклашевский А.В., Шадрин Г.А. Элементарный расчетный практикум по химической связи (уч. пособие). М.: МГПИ. 1973. 186 с.
7. Симкин Б.Я., Клецкий М.Е., Глуховцев М.Н. Задачи по теории строения молекул. Ростов-наДону, Феникс. 1997. 150 с.
8. Краткий справочник физико-химических величин. М.: Высшая школа. 1980.
 |

|  |  |
| --- | --- |
| **Университеттік****моральдық-****этикалық****құндылықтар****шеңберіндегі****курстың****академиялық****саясаты** | **Академиялық тәртіп ережелері:**Барлық білім алушылар ЖООК-қа тіркелу қажет. Онлайн курс модульдерін өту мерзімі пәндіоқыту кестесіне сәйкес мүлтіксіз сақталуы тиіс.**НАЗАР АУДАРЫҢЫЗ!** Дедлайндарды сақтамау баллдардың жоғалуына әкеледі! Әрбіртапсырманың дедлайны оқу курсының мазмұнын жүзеге асыру күнтізбесінде (кестесінде),сондай-ақ ЖООК-та көрсетілген.**Академиялық құндылықтар:**- Практикалық / зертханалық сабақтар, СӨЖ өзіндік, шығармашылық сипатта болуы керек.- Бақылаудың барлық кезеңінде плагиатқа, жалған ақпаратқа, көшіруге тыйым салынады.- Мүмкіндігі шектеулі студенттер Aisulu.Zhusupova@kaznu.kz е-мекенжайы бойыншаконсультациялық көмек ала алады.\* СӨЖ тапсырмалары көлемді, алайда студенттің зерттелетін материалдың мазмұнынтерең игеруіне мүмкіндік береді. СӨЖ тапсырмаларын орындауға дәрістегі тиістітақырыпты игергеннен кейін бастаған жөн. СӨЖ-да көрсетілген сұрақтар емтихансұрақтарына қосылады.Дәріс барысында пікірталастар өткізіледі, себебі лекторғастуденттердің материалды жалпы түсінуін бағалауға, оларға проблемалық мәселелердіанықтауға және түсіндіруге мүмкіндік береді. |
| **Бағалау және****аттестаттау****саясаты** | **Критерийлерді бағалау:** оқу нәтижелерін дескрипторларға қатысты бағалау (аралықбақылау мен емтихандарда құзыреттіліктің қалыптасуын тексеру).**Жиынтық бағалау:** аудиториядағы жұмыс белсенділігін бағалау (вебинарда);орындалған тапсырманы бағалау.**Қорытынды бағаны есептеу формуласы:**Семестрдің қорытынды бағасы (максимум 100%) аралық бақылаудың орташабағасын (АБ, MT) (әр 5 аптада) және емтихан бағасын (E) келесі өрнекке сәйкесқамтиды: [АБ №1 + MT + АБ№2)/3] x0.6 + Эк0.4 АБ, MT және емтиханға пәнніңтеориялық және практикалық материалының мазмұнын көрсететін сұрақтар кіреді. |

**Оқу курсының мазмұнын іске асырудың күнтізбесі (кестесі)**

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Апта | Тақырып атауы | ОН | ЖИ | Сағат саны | Максималды балл | Білімді бағалау формасы | Сабақты жүргізу формасы/платформа |
| **Модуль 1** |  |
| 6 | **Л6.** Қазіргі кездегі химиялық байланыс теориялары бойынша молекулалардың кеңістіктік құрылымын сипаттау. Гиллеспидің ЛЖЭТ әдісі. Негізгі ережелер. | ОН 1 | ЖИ 1.1.ЖИ 1.2 | 2 |  | Студенттің өзін-өзі бақылауы (қысқаша түйіндеме дәрістерден өзін-өзі бақылау сұрақтарын қараңыз) | ZOOM-да видеолекция |
| 6 | **ПС6** Гиллеспи әдісімен молекулалардың конфигурациясын анықтау. | ОН 1  | ЖИ 1.1.ЖИ 1.2. | 1 | 10 | Кіріспе бақылау: мини-бақылау жұмысы | ZOOM-да вебинар |
| Есептер шығару және нәтижелерді талқылау |
| 6 | **ЛС6** Gaussview көмегімен молекула конфигурациясын құру |  |  | 2 |  |  |  |
| 7 | **Л7.** Симметрия туралы ілім. Симметрия химияда.Симметрия элементтері және операциялары. Топтың анықтамасы және қасиеттері. Симметрияның нүктелі топтары. Молекулаларды симметрия топтары бойынша классификациандыру | ОН1 | ЖИ 1.3 | 2 |  | Студенттің өзін-өзі бақылауы (қысқаша түйіндеме дәрістерден өзін-өзі бақылау сұрақтарын қараңыз) | ZOOM-да видеолекция |
| 7 | **ПС7** Молекулалардың симметрия элементтерімен операцияларын жяне симетриялық топтарың анықтау |  | ЖИ 1.2ЖИ 1.3. | 1 | 10 | Кіріспе бақылау:мини-бақылаужұмысы | ZOOM-да вебинар |
| Есептер шығару және нәтижелерді талқылау |
| 7 | **ЛС7** Молекуланың геометриялық параметрлерін анықтау |  |  | 2 | 5 |  |  |
| 7 | **СОӨЖ 1**. **1**СӨЖ №1 бойынша консультация. |  |  |  |  |  |  |
| 8 | **Л8.** Координатты түрлендіру. Симметрия операцияларының таңбалары. Топтардың матрицалық көрінісі. |  | ЖИ 1.3.ЖИ 1.4 | 2 |  | Студенттің өзін-өзі бақылауы (қысқаша түйіндеме дәрістерден өзін-өзі бақылау сұрақтарын қараңыз) | ZOOM-да видеолекция |
| 8 | **ПС3** Симметрия операциясын орындау және Келли кестесін құру. |  | ЖИ 1.4 | 1 | 10 | Кіріспе бақылау:мини-бақылаужұмысы | ZOOM-да вебинар |
| Есептер шығару және нәтижелерді талқылау |
| 8 | **ЛС8** Химиялық әдістермен - күрделі кванттық молекулалардағы молекула мен симметрия элементтерінің конфигурациясы негізінде молекулалардың нүктелік тобы мен дипольдік моментін есептеңіз. |  |  | 2 | 5 |  |  |
| 9 | **Л4.** Координатты түрлендіру. Симметрия операцияларының таңбалары. Топтардың матрицалық көрінісі. Характерлер кестесі. Келтірілген көріністер. Тура туындылар. Келтірілмеген көріністер | ОН1  | ЖИ 1.4. | 1 |  | Студенттің өзін-өзі бақылауы (қысқаша түйіндеме дәрістерден өзін-өзі бақылау сұрақтарын қараңыз) | ZOOM-да видеолекция |
| 9 | **ПС4** Топтық теорияны қолдана отырып, гибридті және молекулалық орбитальдарды құру үшін характерлік кестелерді қолдану | ОН 3 | ЖИ 3.1ЖИ 3.2 | 1 | 10 | Кіріспе бақылау:мини-бақылаужұмысы | ZOOM-да вебинар |
| Есептер шығару және нәтижелерді талқылау |
| 9 | **ЛС9** Нүктелік симметрия тобын және молекуланың дипольдік моментін анықтау бойынша зертханалық жұмыстар бойынша есеп беру |  |  |  |  |  |  |
| 9 | **СӨЖ1.**СӨЖ №1 бойынша орындалған тапсырмаларды өткізу.Дедлайн – ағымдағы аптаның сенбі күні сағат 23-00 –ге дейін. | ОН 1 | ЖИ 1.2.ЖИ 1.3ЖИ 1.4 |  | 20 | Жазбаша есеп беру | Жазбаша есеп беруді тапсыру(pdf-файлды порталға енгізу) |
| 9 | **СОӨЖ 2** СӨЖ тапсырмаларын орындау нәтижелерін талдау, №2 СӨЖ тапсырмалары бойынша, дәріс материалдарына қатысты сұрақтар бойынша кеңес беру, 1 бақылау жұмысын тапсыруға кеңес беру, |  |  |  |  |  |  |
| 10 | **Л10** Кванттық механика және кванттық химия туралы негізгі түсініктер мен постулаттар. Операторлар. Толқын функциясы. Энергия. Бір және көп электронды атом үшін стационарлық Шредингер теңдеуі | ОН 1 | ЖИ 1.5 | 2 |  | Студенттің өзін-өзі бақылауы (қысқаша түйіндеме дәрістерден өзін-өзі бақылау сұрақтарын қараңыз) | ZOOM-да видеолекция |
| 10 | **ПС10.**Негізгі кванттық- химиялық шамаларды анықтау | ОН 3 | ЖИ 3.1ЖИ 3.2 | 1 | 10 | Кіріспе бақылау: мини-бақылау жұмысы | ZOOM-да вебинар |
| Есептер шығару және нәтижелерді талқылау |
| 10 | **ЛС 10** Бақылау жұмысы |  |  | 2 | 20 | Бақылау жұмысы (жазбаша) | ZOOM-да вебинар |
| 10 | **АБ 1** |  |  |  | 100 |  |  |
| 11 | **Л11** Молекулалық энергияның түрлері. Спектроскопия бөлшектер энергиясының өзгеруін тіркеу әдісі ретінде. Молекулалық спектроскопияның түрлері және негізгі түсініктері. Өтпелердің ықтималдығы. Іріктеу ережелерін түсіну. Диатомдық молекулалардың айналу энергиясы және айналу спектрлері. Қатты ротатор ақаулығы. Микротолқынды спектроскопия. Байланыстың ұзындығын анықтау. Іріктеу ережелері | ОН 1 | ЖИ 1.5 | 2 |  | Студенттің өзін-өзі бақылауы (қысқаша түйіндеме дәрістерден өзін-өзі бақылау сұрақтарын қараңыз) | ZOOM-да видеолекция |
| 11 | **ПС8.** Айналмалы спектрлер бойынша молекулалық параметрлерді есептеу | ОН 2 | ЖИ 3.1ЖИ 3.2 | 1 | 10 | Кіріспе бақылау:мини-бақылаужұмысы | ZOOM-да вебинар |
| Есептер шығару және нәтижелерді талқылау |
| 11 | **ЛС 11** Гаусс көмегімен әр түрлі спектрлерді болжаңыз және бұл нәтижелерді Gaus View көмегімен көрсетіңіз |  |  | 2 | 5 |  |  |
| 11 | **СОӨЖ3**. СӨЖ№2 бойынша консультация |  |  |  |  |  |  |
| 12 | **Л12** Екі атомды молекулалардың тербеліс энергиясы және тербеліс спектрлері. Гармоникалық және ангармоникалық осцилляторларды жуықтау. Молекулалардың энергетикалық күйлер бойынша статистикалық таралуы. Спектрлік сызықтардың қарқындылығы. Екі атомды молекулалардың тербелмелі-айналмалы күйлері мен спектрлері. ИҚ, ЖКШ спектрлерінің айналу құрылымының 0, P, Q, R және S-тармақтары. | ОН 2 | ЖИ 2.1ЖИ 2.2ЖИ 2.3 | 2 |  | Студенттің өзін-өзі бақылауы (қысқаша түйіндеме дәрістерден өзін-өзі бақылау сұрақтарын қараңыз) | ZOOM-да видеолекция |
| 12 | **ПС12.** Тербелмелі және тербелмелі-айналмалы спектрлер бойынша молекулалық тұрақтыларды есептеу.. | ОН 2 | ЖИ 2.1ЖИ 2.2ЖИ 2.3 | 1 | 10 | Кіріспе бақылау: мини-бақылау жұмысы | ZOOM-да вебинар |
| Есептер шығару және нәтижелерді талқылау |
| 12 | **ЛС 12** No11 зертханалық жұмыс бойынша есеп беру |  |  | 2 | 5 |  |  |
| 13 | **Л13.** Екі атомды молекулалардың термдері. Кванттық сандар және атомдық термдер. Негізгі кү шарттары. np2 конфигурациясына арналған микрокүй кестесі... | ОН 3 | ЖИ 3.1ЖИ 3.2ЖИ 3.3 | 2 |  | Студенттің өзін-өзі бақылауы (қысқаша түйіндеме дәрістерден өзін-өзі бақылау сұрақтарын қараңыз) | ZOOM-да видеолекция |
| 13 | **ПС13.** Атомдық термдердің бөлінуінің анықтамасы. Микрокүйлер. Микрокүй кестелері | ОН 3 | ЖИ 3.1ЖИ 3.2ЖИ 3.3 |  | 10 | Кіріспе бақылау:мини-бақылаужұмысы | ZOOM-да вебинар |
| Есептер шығару және нәтижелерді талқылау |
| 13 | **ЛС13** Этиленнің ИҚ және Роман-спектрін есептеу |  |  |  | 5 |  |  |
| 13 | **СОӨЖ4** №2 СӨЖ тапсырмалары бойынша, дәріс материалдары бойынша кеңес беру, 2 бақылау жұмысын тапсыруға кеңес беру, |  |  |  |  |  | Вебинар ZOOM |
| 14 |  **Л14.**Кристалдық өріс теорияс. Күшті және әлсіз өрістер. Атомдық термдердің бөлінуі. Жоғары және төменгі спиндік күйлері. Кристалл өрісі бойынша тұрақтану энергиясы, оны есептеу. Әр түрлі электрондық dn-конфигурациялары үшін әлсіз кристалды өрістегі атомдық термдерді бөлу (топтық теорияны қолдану). Комплексті қосылыстар спектріндегі электронды ауысулардың санын түсіндіру.. | ОН 3 | ЖИ 3.4ЖИ 3.5 | 2 |  | Студенттің өзін-өзі бақылауы (қысқаша түйіндеме дәрістерден өзін-өзі бақылау сұрақтарын қараңыз) | ZOOM-да видеолекция |
| 14 | **ПС14**Тұрақтану энергиясын кристалл өрісі арқылы анықтау, оны есептеу. Әлсіз кристалды өрісте әртүрлі dn-конфигурацияларға арналған электронды термдерді бөлу | ОН 3 | ЖИ 3.4ЖИ 3.5 | 1 | 10 | Кіріспе бақылау: мини-бақылау жұмысы | ZOOM-да вебинар |
| Есептер шығару және нәтижелерді талқылау |
| 14 | **ЛС 14** No13 зертханалық жұмыс бойынша есеп беру |  |  | 2 | 5 |  |  |
| 14 | СӨЖ №2: СӨЖ №2 бойынша орындалған тапсырмаларды өткізу.Дедлайн – ағымдағы аптаның сенбі күні сағат 23-00 –ге дейін. | ОН 3 | ЖИ 3.4 |  | 20 | Жазбаша есеп беру | Жазбаша есеп беруді тапсыру(pdf-файлды порталға енгізу) |
| 15 | **Л15**. Химиялық байланыс теориясы, молекулалық орбиталық әдіс. Гейтлер - Лондон әдісі (валенттік байланыс әдісі - ВБ әдісі), химиялық байланыстың себебі.Қолданбалы кванттық химия. Хюккельдің қарапайым MO әдісімен кванттық-химиялық есептеулер. Цис-бутадиен мен этиленнің МО-ны топтық теорияны қолдану арқылы есептеу. Төмендетілмеген кескіндермен түрлендірілетін МО-ның құрылысы. MO энергияны есептеу.. | ОН 3ОН 4 | ЖИ 3.4ЖИ 4.1ЖИ 4.2ЖИ 4.3 | 2 |  | Студенттің өзін-өзі бақылауы (қысқаша түйіндеме дәрістерден өзін-өзі бақылау сұрақтарын қараңыз) | ZOOM-да видеолекция |
| 15 | **ПС15** MOX әдісімен атомдық орбитальдардағы коэффициенттерді этилен мен бутадиенге есептеу. Байланыс реті, атомдар заряды, еркін валенттілік индексі. Коулсонның молекулалық диаграммалары. Қарапайым Хюккель әдісі негізінде ануллендердің қасиеттерін болжау. | ОН5 | ЖИ 5.2ЖИ 5.3 | 1 |  | Кіріспе бақылау: мини-бақылау жұмысы | ZOOM-да вебинар |
| Есептер шығару және нәтижелерді талқылау |
| 15 | **ЛС 15 Бақылау жұмысы** | ОН3ОН4 | ЖИ 3.4ЖИ 4.1ЖИ 4.2ЖИ 4.3 | 2 | 20 | Бақылау жұмысы ( жазбаша ) | ZOOM-да вебинар |
| 15 | **СОӨЖ 3**. №2 СӨЖ тапсырмалары бойынша, дәріс материалдарына қатысты сұрақтар бойынша талдау, емтиханға дайындық бойынша кеңестер |  |  | 1 |  |  |  |
| 15 | **АБ №2** |  |  |  | 100 |  |  |

|  |  |
| --- | --- |
| Факультет деканы, х.ғ.к, қауым.профессор | Тасибеков Х.С. |
| Әдістемелік бюро төрайымы, х.ғ.к., доцент | Мангазбаева Р.А. |
| Кафедра меңгерушісі х.ғ.д, профессор | Аубакиров Е.А. |
| Лектор, х.ғ.к., доцент | Жусупова А.К. |