

СИЛЛАБУС
2023-2024 оқу жылының көктемгі семестрі
«БВ07104 – Органикалық заттардың химиялық технологиясы» білім беру бағдарламасы

Дисциплина Коды және Дисциплина атауы	Студенттің өздік жұмысы (СӨЖ)	Сағат саны			Кредит саны	Студенттің оқытушымен өзді жұмысы (СОӨЖ)
		Лекция лар (Л)	Практик алық сабақтар (ПС)	Зерт хана лық саба қтар (ЗС)		
МНТР 4332 Химия- технологиялық үдерістерді модельдеу	4	1,5	4,5	-	6	8

КУРСТЫҢ АКАДЕМИЯЛЫҚ МӘЛІМЕТТЕРІ

Оқыту форматы	Курс түрі	Лекциялардың түрлері	Практикалық сабақтардың түрлері	Қорытынды бақылау формасы
<i>офлайн</i>	Аралас	Дәріс-диалог, дәріс- презентация	-	Стандартты жазбаша офлайн емтихан
Оқытушы - (лар)	Сайлау Жасулан Асхатулы			
e-mail:	Sailau.online@gmail.com			
Телефоны:	87777477277			

ПӘННІҢ АКАДЕМИЯЛЫҚ ПРЕЗЕНТАЦИЯСЫ

Пәннің мақсаты	Оқытудан күтілетін нәтижелер (ОБ)*	РО (ИД) қол жеткізу индикаторлары
Химиялық құрылымдардың компьютерлік модельдерін құрастыру және химиялық және технологиялық процестерді модельдеуге арналған компьютерлік бағдарламаларды қолдану қабілетін қалыптастыру. Сондай-ақ осы модельдер мен модельдеулерді шешу және бағалау.	1.Химиялық процестерді компьютерлік модельдеудің тұжырымдамалары мен процедураларын түсіну. Компьютерлік модельдеуге арналған бағдарламалық қамтамасыз етудің негізгі бөліктерін білу, сонымен қатар осы модельдерді жіктей білу.	1.1 Аса маңызды химиялық-технологиялық процестер параметрлерді(өнімділік, қарқындылық, тұтыну коэффициенті) есептейді 1.2 өнімнің белгілі бір түрлерін өндіру процесінде мақсатты өнімнің шығымдылығына, шикізаттың конверсиялану дәрежесіне, селективтілігіне әсер ететін кинетикалық және термодинамикалық параметрлер
	2.Химиялық-технологиялық процестердің сақталуының жалпы заңдылықтары мен тепе-теңдік теңдеулерінің әдіснамасын қолдана білу. Компьютерлік бағдарламалық қамтамасыз етуге материалдық және химиялық процестерді енгізу тәжірибесін жинақтау модельдеу.	2.1 Органикалық және бейорганикалық өндіріс технологиялары, олардың экономикалық өндірістің шикізат және энергетика салаларындағы орнын анықтау; 2.2 нысаналы өнімді өндірудің тиімділігін арттыру міндеттеріне сәйкес химия-технологиялық өндіріс; 2.3 Бастап тұжырымдамалық троиттер, тұжырымдама-технологиялық және химиялық схемалардың химиялық-технологиялық жүйелерді
	3.Өлшемдік және өлшемсіз негізде эмпирикалық модельдерді қолдану. Компьютерлік модельдеу үшін химиялық процестерді үлкейту және кішірейту кезінде осы эмпирикалық модельдерді қолдану.	3.1 Бастаптенестіреді қолданыстағы химия-технологиялық өндірістің теориялық мәндерімен жүргізілген зертханалық зерттеулер бойынша есептік деректер; 3.2 зертханалық процестің оңтайлы параметрлері; 3.Негіздеме жасайды нысаналы өнімнің шығымы мен құрамын талдау негізінде өндіріс сапасын арттыру үшін құралдарды таңдау;
	4. Компьютерлік модельдерді жеңілдетудің әртүрлі стратегияларын және ілеспе қателерді бағалау.	4.1 зерттелетін технологиялық процестің материалдық балансын

		есептейді; 4.2 технологиялық процестің материалдық балансы бойынша есептелген деректерді анықтамалық деректермен теңестіреді; 4.3 технологиялық процестің экономикалық тиімділігі зерттеледі;
	5. Компьютерлік модельдерді жеңілдетудің әртүрлі стратегияларын және ілеспе қателерді бағалау.	5.1 технологиялық процестің мысалында қалдықсыз немесе аз қалдықты өндірістің принципті-технологиялық сызбасы зерттеледі; 5.2 Белгілі бір технологиялық процесс үшін шикізат пен энергияны пайдалану тиімділігін арттыру жолдары
Пререквизиттер	"Бейорганикалық химия", "Аналитикалық химия" "Физикалық химия", "Органикалық химия", "Жоғары математика"	
Постреквизиттер	"Химиялық технологияның негізгі процестері мен аппараттары"	
Оқу ресурстары	<p>Әдебиет: онегізгі, қосымша.</p> <p>1. Степанов, Николай Федорович. Квантовая механика и квантовая химия : учебник и практикум для академического бакалавриата / Н.Ф.Степанов .— М. : Юрайт, 2018 . - Ч. 1 .— 2-е изд., испр. и доп. — 232.</p> <p>2. Каплан И.Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы / И.Г. Каплан – Москва : Лаборатория знаний, 2017. – 397 с. – ISBN 978-5-00101-503-1. – Текст : электронный // ЭБС «Консультант студента» : [сайт]. – URL : https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001015031.html.</p> <p>3. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для вузов / В.Г. Цирельсон - Москва : Лаборатория знаний, 2017. - 522 с. (Учебник для высшей школы) - ISBN 978-5-00101-502-4. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001015024.html</p> <p>4. Компьютерная химия : учебно-методическое пособие для вузов : [для студ. 5 к. очной формы обуч. хим. фак. специальности 020101 - Химия] / Воронеж. гос. ун-т ; сост.: Е.В. Бутырская, Л.С. Нечаева .— Воронеж : Издательскополиграфический центр Воронежского государственного университета, 2011 .— 27 с. : ил. — Библиогр.: с. 27.</p> <p>Зерттеушілік инфрақұрылым</p> <p>1. КазҰУ компьютерлік кабинет</p> <p>Кәсіби ғылыми базалар деректердін</p> <p>1. http://link.springer.com/ 2. https://search.crossref.org/</p> <p>Интернет-ресурстар</p> <p>1. https://www.ifce.kz/index.php/ru/glavnaya-ru/ 2. https://catalysis.ru/ 3. http://www.nkz-ooo.ru/</p> <p>Бағдарламалық қамтамасыз ету қамтамасыз ету</p> <p>1. Gaussian 16; 2. Gaussian View 6.</p>	

<p>Пәннің академиялық саясаты</p>	<p>Пәннің академиялық саясаты анықталады <u>Академиялық саясатпен және Әл-Фараби атындағы ҚазҰУ-дың академиялық адалдық саясатымен.</u> Кұжаттар АЖ-ның басты бетінде қолжетімді Univer.</p> <p>Ғылым мен білімнің интеграциясы. Студенттердің, магистранттар мен докторанттардың ғылыми-зерттеу жұмыстары – бұл оқу үдерісін тереңдету. Ол тікелей кафедраларда, зертханаларда, университеттің ғылыми және жобалық бөлімшелерінде, студенттердің ғылыми-техникалық бірлестіктерінде ұйымдастырылады. Білім берудің барлық деңгейлеріндегі білім алушылардың өзіндік жұмысы заманауи ғылыми-зерттеу және ақпараттық технологияларды қолдана отырып, жаңа білім алу негізінде зерттеушілік дағдылар мен құзыреттіліктерді дамытуға бағытталған. Зерттеу университетінің оқытушысы ғылыми-зерттеу қызметінің нәтижелерін дәрістер мен семинарлар (практикалық) сабақтар, зертханалық сабақтар тақырыптарына және СӨЖ, СӨЖ тапсырмаларына біріктіреді, олар көрініс табады. силлабуста және оқу сабақтарының тақырыптарының өзектілігіне жауап береді және тапсырмаларды орындау.</p> <p>Сабаққа қатысу. Әрбір тапсырманың орындалу мерзімі пән мазмұнын жүзеге асыру күнтізбесінде (кестесінде) көрсетілген. Мерзімдерді сақтамау ұпайлардың жоғалуына әкеледі.</p> <p>Академиялық адалдық. Тәжірибелік/зертханалық сабақтар, БӨ білім алушының дербестігін, сыни ойлауын, креативтілігін дамытады. Тапсырмаларды орындаудың барлық кезеңдерінде плагиатқа, жалғандыққа, шпаргалкаларды қолдануға, алдауға жол берілмейді.</p> <p>Теориялық оқыту кезеңінде және емтихандарда академиялық адалдықты сақтау негізгі саясаттардан басқа мыналарды реттейді <u>"Қорытынды бақылауды өткізу қағидалары", "Ағымдағы оқу жылының күзгі/көктемгі семестріне қорытынды бақылауды өткізуге арналған нұсқаулық", "Қарыз алу үшін студенттердің мәтіндік құжаттарын тексеру туралы ереже".</u></p> <p>Кұжаттар АЖ-ның басты бетінде қолжетімді Univer.</p> <p>Инклюзивті білім берудің негізгі принциптері. Университеттің білім беру ортасы гендерлік, нәсілдік/этникалық тегіне, діни наным-сеніміне, әлеуметтік-экономикалық жағдайына, студенттің физикалық денсаулығына және т.б. қарамастан, оқытушы тарапынан барлық білім алушылар мен білім алушылардың бір-біріне деген қолдауы мен тең қарым-қатынасы әрқашан болатын қауіпсіз орын ретінде ойластырылған. . Барлық адамдарға құрдастары мен курстастарының қолдауы мен достығы қажет. Барлық студенттер үшін прогреске қол жеткізу мүмкін емес нәрседен гөрі не істей алатындығында. Әртүрлілік өмірдің барлық қырларын нығайтады.</p> <p>Барлық білім алушылар, әсіресе мүмкіндігі шектеулі білім алушылар консультациялық көмекті телефон арқылы ала алады: 87777477277/ e-mail: sailau.online@gmail.ru.</p> <p>Интеграция ЖҚБС (massive open online course). Интеграция жағдайында ЖҚБС пән бойынша барлық білім алушылар ЖАО-да тіркелуі керекС. Модульдерді өту мерзімдері ЖҚБС пәнді оқу кестесіне сәйкес қатаң сақталуы тиіс.</p> <p>НАЗАР АУДАРЫҢЫЗ! Әрбір тапсырманың орындалу мерзімі пән мазмұнын жүзеге асыру күнтізбесінде (кестесінде), сондай-ақ ЖАО-да көрсетілген. Мерзімдерді сақтамау ұпайлардың жоғалуына әкеледі.</p>
--	--

ОҚЫТУ, ОҚУ ЖӘНЕ БАҒАЛАУ ТУРАЛЫ АҚПАРАТ

Баллмен-рейтингтік оқу жетістіктерін есепке алуды бағалаудың әріптік жүйесі			Бағалау әдістері	
Бағалау	Цифрлық баламасы баллдарды	Балдар, % мазмұны	Дәстүрлі жүйе бойынша бағалау	
A	4,0	95-100	Өте жақсы	<p>Критериалды бағалау бағалау – оқытудың нақты қол жеткізілген нәтижелерін нақты әзірленген критерийлер негізінде күтілетін оқу нәтижелерімен байланыстыру процесі. Негізделген қалыптастырушы және жиынтық бағалау кезінде.</p> <p>Қалыптастырушы бағалау – күнделікті оқу іс-әрекеті барысында жүргізілетін бағалау түрі. Үлгерімнің ағымдағы көрсеткіші болып табылады. Білім алушы мен оқытушы арасындағы жедел өзара байланысты қамтамасыз етеді. Білім алушының мүмкіндіктерін анықтауға мүмкіндік береді, қиындықтарды анықтау, ең жақсы нәтижелерге қол жеткізуге көмектесу, мұғалімнің оқу-тәрбие үдерісін дер кезінде ретке келтіру. Тапсырмалардың орындалуы, дәрістер, семинарлар, практикалық сабақтар (пікірталастар, викториналар, дебаттар, дөңгелек үстелдер, зертханалық жұмыстар және т.б.) барысында аудиториядағы жұмыс белсенділігі бағаланады. Алған білімдері мен құзыреттіліктері бағаланады.</p> <p>Жиынтық бағалау – пәннің бағдарламасына сәйкес бөлімді оқу аяқталғаннан кейін жүргізілетін бағалау түрі. Өткізіледі 3-4 ОР орында кезінде семестрде бір ретС. Бұл дескрипторларға қатысты күтілетін оқу нәтижелерінің дамуын бағалау. Пәннің белгілі бір кезеңдегі меңгеру деңгейін анықтауға және бекітуге мүмкіндік береді. Оқыту нәтижелері бағаланады.</p>
A-	3,67	90-94		
B+	3,33	85-89	Жақсы	<p>Қалыптастырушы және жиынтық бағалау</p> <p>Семинарлық сабақтарға арналған жұмыс 21</p> <p>Өзіндік жұмыс 50</p> <p>Коллоквиум 29</p> <p>Қорытынды бақылау (емтихан) 40</p>
B	3,0	80-84		
B-	2,67	75-79		
C+	2,33	70-74		
C	2,0	65-69		
C-	1,67	60-64	Қанағаттанарлық	
D+	1,33	55-59		

D	1,0	50-54	Қанағаттанарлықсыз	БАРЛЫҒЫ	100
FX	0,5	25-49			
F	0	0-24			
Пән мазмұнын жүзеге асырудың күнтізбесі (кестесі). Оқыту мен оқытудың әдістері.					
Апта	Тақырыптың атауы			Сағат саны	Макс. балл
МОДУЛЬ 1					
1	Лекция 1. Кіріспе. Компьютерлік химия не үшін қажет? Компьютерлік химия түрлері.			1	
	Семинар 1. Техникалық қауіпсіздік. Компьютерлік модельдеу программаларын қалай орнатады? Программалар арасындағы айырмашылықтар? Gauss View 6, Gaussian 16 программаларын компьютерге орнату.			2	3
2	Лекция 2. Компьютерлік химиясына шолу. Молекулалық механика. Электрондық құрылым әдістері. Химиялық модельдеу құрамдары. Химиялық модельдеу заттардың анықтамасы.			1	
	Семинар 2. Молекулалардың құрылысы. Молекулаларды құру әдісі. Элементтер мен фрагменттерді орналастыру. Болдырмау және Қайталау. Құрылым параметрлерін қарау және реттеу. Сұрау режимі. Валенттіктерді қосу және жою.			2	3
	СОӨЖ 1. СӨЖ 1 орындалуы бойынша консультация				
3	Лекция 3. Энергияны есептеу. Энергетикалық есептеулерді орнату. Нәтижелерді Гаусс бойынша нәтижелерден іздеу. Молекулалық орбитальдар және орбиталық энергиялар. Зарядтың таралуы.			1	
	Семинар 3. Компьютерлік модельдеу арқылы Gaussian программасымен есеп шығару.			2	3
4	Лекция 4. Геометрияны оңтайландыру. Потенциалдық энергия беттері. Оңтайландыру нәтижелерін зерттеу. Өтпелі құрылымдардың орналасуын анықтау. Күрделі оңтайландыру жағдайларын өңдеу.			1	
	Семинар 4. Компьютерлік модельдеу арқылы Gaussian программасымен есеп шығару.			2	3
	СОӨЖ 2. СӨЖ 1 тапсыру				25
5	Лекция 5. Жиілікті есептеу. Жиілік тапсырмаларын енгізу. Жиілігі мен қарқындылығы. Қалыпты режимдер.			1	
	Семинар 5. Компьютерлік модельдеу арқылы Gaussian программасымен есеп шығару.			2	3
	СОӨЖ 3. СӨЖ 2 орындалуы бойынша консультация				
6	Лекция 6. Термохимия. Нөлдік нүкте энергиясы және жылу энергиясы. Поляризация және гиперполяризация			1	
	Семинар 6. Компьютерлік модельдеу арқылы Gaussian программасымен есеп шығару.			2	3
	СОӨЖ 4. СӨЖ 2 тапсыру				25
МОДУЛЬ 2					
7	Лекция 7. Негізгі жиынтықтың әсерлері. Минималды негізгі жиынтықтар. Бөлінген валенттілік негіздерінің жиынтығы. Поляризацияланған негізгі жиынтықтар. Диффузиялық функциялар. Жоғары бұрыштық импульсі бар негізгі жиынтықтар.			1	
	Семинар 7. Компьютерлік модельдеу арқылы Gaussian программасымен есеп шығару. 1-6 лекциялар бойынша коллоквиум			2	3
					29
Аралық бақылау 1					100
8	Лекция 8. Сәйкес теориялық әдісті таңдау. Жартылай эмпирикалық әдістерді қолдану. Жартылай эмпирикалық әдістердің шектеулері. Электрондық корреляция әдістері және пост-SCF методы. Хартри-Фок теориясының шегі. MPn Әдістері. Байланысты кластерлер мен квадраттық конфигурацияның өзара әрекеттесу әдістері. Тығыздық функционалы теориясының әдістері. Ресурстарды пайдалану.			1	
	Семинар 8. Компьютерлік модельдеу арқылы Gaussian программасымен есеп шығару.			2	3
	СОӨЖ 5. СӨЖ 3 орындалуы бойынша консультация				
9	Лекция 9. Жоғары дәлдіктегі энергетикалық модельдер. Термохимияны болжау. Атомизация энергиясы. Электронға жақындық. Иондану потенциалдары. Протондарға жақындық. Модельдердің химиялық қасиеттерін бағалау. Таңдалған модельдік химиялық заттардың салыстырмалы дәлдігі.			1	
	Семинар 9. Компьютерлік модельдеу арқылы Gauss view программасымен есеп шығару.			2	3
10	Лекция 10. Химиялық реакциялар мен реактивтілікті зерттеу. Электрондық тығыздықты түсіндіру. Реакция энтальпияларын есептеу. Потенциалдық энергия беттерін зерттеу. Потенциалдық энергиямен бетті сканерлеу. Потенциалдық энергия бетін зерттеу.т Изодесмдік реакциялар. Изодесмикалық реакциялардың шектеулері.			1	
	Семинар 10. Компьютерлік модельдеу арқылы Gauss view программасымен есеп шығару.			2	3

