

СИЛЛАБУС
Осенний семестр 2023-2024 учебного года
Образовательная программа «7М01503 Химия»

ID и наименование дисциплины	Самостоятельная работа обучающегося (СРО)	Кол-во кредитов			Общее кол-во кредитов	Самостоятельная работа обучающегося под руководством преподавателя (СРОП)
		Лекции (Л)	Практ. занятия (ПЗ)	Лаб. занятия (ЛЗ)		
ID100946 Компьютерное моделирование в образовании и химии	5	3,00	6,00	0,00	9	7
АКАДЕМИЧЕСКАЯ ИНФОРМАЦИЯ О ДИСЦИПЛИНЕ						
Формат обучения	Цикл, компонент	Типы лекций	Типы практических занятий	Форма и платформа итогового контроля		
Офлайн	ПД, КпВ	Дискуссия, аналитические	Семинары	Устный экзамен, система «Univer»		
Лектор - (ы)	и.о. доцента Кенес Кайрат Маратулы					
e-mail:	Kenges.kairat@kaznu.kz					
Телефон:	+77026543371					
АКАДЕМИЧЕСКАЯ ПРЕЗЕНТАЦИЯ ДИСЦИПЛИНЫ						
Цель дисциплины	Ожидаемые результаты обучения (РО)*			Индикаторы достижения РО (ИД)		
Цель курса – сформировать обучающихся способности использовать компьютерное моделирование педагогических исследованиях, а также для предсказания реакционной способности химических веществ. Будут рассмотрены вопросы измерения, сбора, анализа и представления структурированных и неструктурированных данных больших объемов обучающихся и образовательной среде, а также методы молекулярной механики и квантовой химии.	1. Использовать различные методы компьютерного моделирования в конкретных ситуациях и проводить их анализ			1.1 Критически оценивает теоретические знания в отрасли компьютерного моделирования		
				1.2 Использует знания по моделированию для решения конкретных задач		
	2. Определять основные задачи и проводить стандартные моделирования атома и молекул			2.1 Определяет конкретные задачи в зависимости от цели исследования		
				2.2 Разрабатывает оптимальный план проведения компьютерного моделирования подходящий под поставленную задачу		
	3. Знать роль моделей в изучении строения молекул и понимать изменения физико-химических закономерностей			3.1 Может определять образование и свойства молекулы		
				3.2 Умеет обсуждать предпосылки и модели в описании физико-химических свойств молекулы		
	4. Понимать основные методы в квантовых вычислениях и их особенностей			4.1 Понимает основы квантово-механических вычислений		
				4.2 Умеет различать особенности квантово-механических теорий и моделей		
	5. Понимать основные процессы, происходящих при химической реакции, и предположить их модели			5.1 Может характеризовать основные параметры, влияющие на протекание химической реакции и ее характеристики		
				5.2 Понимает моделирование химических реакций и определение параметров реакции.		
Пререквизиты	[74493] Современная общая химия, [90630] Организация и планирование научных исследований (англ), [71428] Методология химико-педагогических исследований					
Постреквизиты	[77949] Исследовательская практика, [90027] Выполнение магистерской диссертации					
Учебные ресурсы	Литература: основная					

	<p>1. Leszczynski J. (ed.). Handbook of computational chemistry. – Springer Science & Business Media, 2012. – Т. 3.</p> <p>2. Петров А. В. Моделирование процессов и систем. – 2015.</p> <p>3. Иванус А. Системные аспекты методов имитационного моделирования. – Litres, 2022.</p> <p>4. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. – Общество с ограниченной ответственностью Издательство ЮРАЙТ, 2019.</p> <p>5. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. Часть 1. Квантовая механика : учебник и практикум для вузов / А. И. Ермаков. — Москва : Издательство Юрайт, 2023. — 183 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-00127-3.</p> <p>Дополнительная:</p> <p>1. Советов Б.Я., Яковлев С.А. Моделирование систем: Практикум. – М.: Высшая школа, 2016. – 224 с.</p> <p>2. Чертовской В. Д. Моделирование процессов адаптивного автоматизированного управления //Вестник государственного университета морского и речного флота им. адмирала СО Макарова. – 2010. – №. 3 (7). – С. 56-63.</p> <p>Исследовательская инфраструктура</p> <p>1. Центр физико-химических методов исследования и анализа</p> <p>2. Лаборатории кафедры общей и неорганической химии</p> <p>Профессиональные научные базы данных</p> <p>1. Web of Science – https://www.webofscience.com/wos/woscc/basic-search</p> <p>2. Bielefeld Academic Search Engine – https://www.base-search.net/</p> <p>3. PubChem – https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/</p> <p>4. Cambridge Structural Database – https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures</p> <p>5. ChemSpider – http://www.chemspider.com/</p> <p>Интернет-ресурсы</p> <p>1. https://www.mooc-list.com/tags/quantum-chemistry</p> <p>2. http://elibrary.kaznu.kz/ru</p> <p>3. https://next-gen.materialsproject.org/</p> <p>Программное обеспечение</p> <p>1. Gaussian view</p>
<p>Академическая политика дисциплины</p>	<p>Академическая политика дисциплины определяется <u>Академической политикой и Политикой академической честности КазНУ имени аль-Фараби</u>. Документы доступны на главной странице ИС Univer.</p> <p>Интеграция науки и образования. Научно-исследовательская работа студентов, магистрантов и докторантов – это углубление учебного процесса. Она организуется непосредственно на кафедрах, в лабораториях, научных и проектных подразделениях университета, в студенческих научно-технических объединениях. Самостоятельная работа обучающихся на всех уровнях образования направлена на развитие исследовательских навыков и компетенций на основе получения нового знания с применением современных научно-исследовательских и информационных технологий. Преподаватель исследовательского университета интегрирует результаты научной деятельности в тематику лекций и семинарских (практических) занятий, лабораторных занятий и в задания СРОП, СРО, которые отражаются в syllabusе и отвечают за актуальность тематик учебных занятий и заданий.</p> <p>Посещаемость. Дедлайн каждого задания указан в календаре (графике) реализации содержания дисциплины. Несоблюдение дедлайнов приводит к потере баллов.</p> <p>Академическая честность. Практические/лабораторные занятия, СРО развивают у обучающегося самостоятельность, критическое мышление, креативность. Недопустимы плагиат, подлог, использование шпаргалок, списывание на всех этапах выполнения заданий.</p> <p>Соблюдение академической честности в период теоретического обучения и на экзаменах помимо основных политик регламентируют <u>«Правила проведения итогового контроля»</u>, <u>«Инструкции для проведения итогового контроля осеннего/весеннего семестра текущего учебного года»</u>, <u>«Положение о проверке текстовых документов обучающихся на наличие заимствований»</u>. Документы доступны на главной странице ИС Univer.</p> <p>Основные принципы инклюзивного образования. Образовательная среда университета задумана как безопасное место, где всегда присутствуют поддержка и равное отношение со стороны преподавателя ко всем обучающимся и обучающимся друг к другу независимо от гендерной, расовой/ этнической принадлежности, религиозных убеждений, социально-экономического статуса, физического здоровья студента и др. Все люди нуждаются в поддержке и дружбе ровесников и сокурсников. Для всех студентов достижение прогресса скорее в том, что они могут делать, чем в том, что не могут. Разнообразие усиливает все стороны жизни.</p>

join/19%3ameeting_OGYwODZhMzctYWyOC00NDA1LWEwMDItMmRkY2VIY2YxMzEz%40threa
 d.v2/0?context=%7b%22Tid%22%3a%22b0ab71a5-75b1-4d65-81f7-
 f479b4978d7b%22%2c%22Oid%22%3a%226382b9b7-c7ba-472e-a990-8729d189564d%22%7d.

ИНФОРМАЦИЯ О ПРЕПОДАВАНИИ, ОБУЧЕНИИ И ОЦЕНИВАНИИ

Бальдно-рейтинговая буквенная система оценки учета учебных достижений				Методы оценивания													
Оценка	Цифровой эквивалент баллов	Баллы, % содержание	Оценка по традиционной системе														
A	4,0	95-100	Отлично	<p>Критериальное оценивание – процесс соотнесения реально достигнутых результатов обучения с ожидаемыми результатами обучения на основе четко выработанных критериев. Основано на формативном и суммативном оценивании.</p> <p>Формативное оценивание – вид оценивания, который проводится в ходе повседневной учебной деятельности. Является текущим показателем успеваемости. Обеспечивает оперативную взаимосвязь между обучающимся и преподавателем. Позволяет определить возможности обучающегося, выявить трудности, помочь в достижении наилучших результатов, своевременно корректировать преподавателем образовательный процесс. Оценивается выполнение заданий, активность работы в аудитории во время лекций, семинаров, практических занятий (дискуссии, викторины, дебаты, круглые столы, лабораторные работы и т. д.). Оцениваются приобретенные знания и компетенции.</p> <p>Суммативное оценивание – вид оценивания, который проводится по завершению изучения раздела в соответствии с программой дисциплины. Проводится 3-4 раза за семестр при выполнении СРО. Это оценивание освоения ожидаемых результатов обучения в соотнесении с дескрипторами. Позволяет определять и фиксировать уровень освоения дисциплины за определенный период. Оцениваются результаты обучения.</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Формативное и суммативное оценивание</th> <th>Баллы % содержание</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Активность на лекциях</td> <td>0</td> </tr> <tr> <td>Работа на практических занятиях</td> <td>35</td> </tr> <tr> <td>Самостоятельная работа</td> <td>25</td> </tr> <tr> <td>Итоговый контроль (экзамен)</td> <td>40</td> </tr> <tr> <td>ИТОГО</td> <td>100</td> </tr> </tbody> </table>		Формативное и суммативное оценивание	Баллы % содержание	Активность на лекциях	0	Работа на практических занятиях	35	Самостоятельная работа	25	Итоговый контроль (экзамен)	40	ИТОГО	100
Формативное и суммативное оценивание	Баллы % содержание																
Активность на лекциях	0																
Работа на практических занятиях	35																
Самостоятельная работа	25																
Итоговый контроль (экзамен)	40																
ИТОГО	100																
A-	3,67	90-94															
B+	3,33	85-89	Хорошо														
B	3,0	80-84															
B-	2,67	75-79															
C+	2,33	70-74															
C	2,0	65-69	Удовлетворительно														
D+	1,33	55-59															
D	1,0	50-54															
FX	0,5	25-49	Неудовлетворительно														
F	0	0-24															

Календарь (график) реализации содержания дисциплины. Методы преподавания и обучения.

Неделя	Название темы	Кол-во часов	Макс. балл
МОДУЛЬ 1			
Основы моделирования. Современные взгляды на строение атома			
1	Л 1. ЦУР-9. Индустриализация, инновации и инфраструктура: возможности моделирования. Методика компьютерного моделирования. Основные принципы моделирования	2	
	СЗ 1. Методика компьютерного моделирования. Основные принципы моделирования	4	10
2	Л 2. Строение атома. Электрон: электронные конфигурации, орбитальное приближение, эффективный заряд ядра	2	
	СЗ 2. Построение электронных конфигураций атома и энергетических диаграмм	4	10
СРОП 1. Консультации по выполнению СРО 1			
3	Л 3. Понятие эффективного заряда, расчет эффективного ядерного заряда, эффекты проникновения и экранирования	2	
	СЗ 3. Понятие эффективного заряда, расчет эффективного ядерного заряда, эффекты проникновения и экранирования. Расчет эффективного заряда атомного ядра с использованием правил слетера	4	10
	СРО 1. Модели в рамках волновой-корпускулярной теории атомного строения и микрочастиц (презентация)		10
4	Л 4. Важные характеристики атома с позиции орбитального приближения, радиальная функция орбиталей	2	
	СЗ 4. Объяснение закономерностей изменения радиуса, энергии ионизации и сродства электронов. Важные характеристики атома с позиции орбитального приближения, радиальная функция орбиталей	4	10
5	Л 5. Принципы проведения квантово-химических расчетов. Программные пакеты для проведения квантово-химических исследований. Принцип снижения энергии.	2	
	СЗ 5. Решение задач по основным уравнениям, необходимым для проведения квантово-химических расчетов. Программные пакеты для проведения квантово-химических исследований.	4	10

	СРО 2 Программы квантово-химических вычислений (устная, презентационная, групповая работа)		10
МОДУЛЬ 2			
Моделирование молекулярных структур. Физико-химические законы строения молекул			
6	Л 6. Молекулярная орбиталь как основное понятие в химии. Метод молекулярных орбиталей для гетероядерных молекул.	2	
	СЗ 6. Анализ простых гетероядерных молекул методом молекулярных орбиталей без учета теории симметрии.	4	10
	СРОП 3. Консультации по выполнению СРО 3		
7	Л 7. Описание пространственной структуры молекул с помощью современных теорий химической связи. Метод ЭПВО Гиллеспи. Основные положения.	2	
	СЗ 7. Определение конфигурации молекул методом Гиллеспи. Метод ЭПВО Гиллеспи. Основные положения.	4	10
	СРО 3. Выполнение расчетов по определению конфигурации молекул с использованием уравнения Гиллеспи-Найхольма		10
Рубежный контроль 1			100
8	Л 8. Типы энергии молекул. Спектроскопия. Виды и основные понятия молекулярной спектроскопии. Вероятность перехода. Энергия вращения и вращательные спектры двухатомных молекул.	2	
	СЗ 8. Расчет молекулярных параметров по вращательным спектрам	4	10
	СРОП 4. Консультации по выполнению СРО 4		
9	Л 9. Термы двухатомных молекул. Квантовые числа и Термы атомов. Термы основного состояния	2	
	СЗ 9. Определение деления атомных термов. Микросостояния.	4	
10	Л 10. Теория кристаллического поля. Сильные и слабые поля. Случай с высоким и низким спином. Энергия стабилизации кристаллического поля, ее расчет.	2	
	СЗ 10. Теория кристаллического поля. Сильные и слабые поля.	4	10
	СРО 4. Определение основных параметров молекулярной спектроскопии (групповая работа)		15
МОДУЛЬ 3			
Основы квантового моделирование			
11	Л 11. Полуэмпирические методы квантовой химии. Неэмпирические методы квантовой химии.	2	
	СЗ 11. Изучение химических реакций радикального распада квантово-химическим методом. Определение энтальпии разрыва связи в молекуле.	4	10
	СРОП 5. Консультации по выполнению СРО 5		
12	Л12. Квантово-химический расчет основных кинетических параметров химической реакции.	2	
	СЗ 12. Изучение механизма многоступенчатой реакции квантово-химическим методом.	4	10
13	Л 13. Конформационный анализ органической молекулы с использованием процедуры сканирования.	2	
	СЗ 13. Расчет колебательных спектров	4	10
	СРО 5. Условия определения значений энтальпии активации, энтальпии реакции и экспоненциального фактора для конкретной реакции квантово-химическим методом		15
14	Л 14. Методы теории функционала плотности (DFT).	2	
	СЗ 14. Расчет молекул органических соединений с использованием функциональной теории плотности.	4	10
	СРОП 6. Консультации по подготовке к РК по теме «Основы молекулярной спектроскопии»		
15	Л 15. Основы моделирования химических реакций	2	
	СЗ 15. Методы моделирования химических реакций	4	10
	СРОП 7. Консультации по вопросам контрольного экзамена		
Рубежный контроль 2			100
Итоговый контроль (экзамен)			100
ИТОГО за дисциплину			100

КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ

Темы СРО: Модели в рамках волновой-корпускулярной теории атомного строения и микрочастиц (презентация), 10 баллов; Программы квантово-химических вычислений (устная, презентационная, групповая работа), 10 баллов; Выполнение расчетов по определению конфигурации молекул с использованием уравнения

Гиллеспи-Найхольма, 10 баллов; Определение основных параметров молекулярной спектроскопии (групповая работа), 10 баллов; Условия определения значений энтальпии активации, энтальпии реакции и экспоненциального фактора для конкретной реакции квантово-химическим методом, 10 баллов. (40% от 100% РК)

Критерий	«Отлично» 30-40 %	«Хорошо» 20-30%	«Удовлетворительно» 10-20%	«Неудовлетворительно» 0-10%
Понимание теорий и концепций, приведенных в данной дисциплине.	Глубокое понимание теорий, концепций, приведенных в данной дисциплине. Свободно оперирует информацией из учебного материала.	Понимание теорий и концепций, приведенных в данной дисциплине. Достаточное освоение информации из учебного материала.	Ограниченное понимание и усвоение теорий и концепций, приведенных в данной дисциплине. Удовлетворительное освоение информацией из учебного материала.	Поверхностное понимание/отсутствие понимания теорий и концепций, приведенных в данной дисциплине. Неудовлетворительное освоение информацией из учебного материала
Владение навыками проведения практических работ на основе конкретно поставленных задач.	Хорошо связывает теоретические и практические знания. Умело применяет теорию в обработке эмпирических данных.	Понимает, как связать теоретические и практические знания. Применяет теорию в обработке эмпирических данных	Ограниченное понимание взаимосвязи между теорией и практикой. Удовлетворительно применяет теорию в обработке эмпирических данных	Незначительное или отсутствует понимание в взаимосвязи между теорией и практикой. Не умеет применять теорию в обработке эмпирических данных
Полное оперирование информацией полученной из данного курса и их дальнейшее развитие	Отлично оперирует полученной информацией для решения поставленных задач. Умение комбинировать данные из разных источников для достижения цели.	В достаточной степени оперирует полученной информацией для решения поставленных задач. Может использовать знания из других дисциплин.	В удовлетворительной степени оперирует полученной информацией для решения поставленных задач. Ограниченно использует знания из других дисциплин.	Не может оперировать полученной информацией для решения поставленных задач. Отсутствие умения комбинирования знания из разных областей науки.
Умение презентовать проделанную работу	Четко выдержана структура и логика в презентации. Умело оперирует данными и презентует сложные темы в удобном для понимания формате.	Достаточно структурированная презентация. Умеет представлять работу ясно и сдержанно.	В презентации нарушено логичность и последовательность. Есть некоторые ключевые ошибки, и ясность нуждается в улучшении.	Презентация неясная, трудно следовать за содержанием. Много ошибок вследствие неудовлетворительного усвоения материала.

Декан

Председатель Академического комитета

по качеству преподавания и обучения

И.о. заведующего кафедрой

Лектор

Галеева А.К.

Бектемисова А.У.

Ниязбаева А.И.

Кенес К.М.

