

АННОТАЦИЯ
дисциплины Б1.В.ДВ.01.01 «Теория групп в химии»
направление подготовки 04.04.01 – Химия (профиль Неорганическая химия)

Объем трудоемкости: 5 зачетных единиц (180 часов, из них контактных 72,5 часа: лекционных 36 ч., лабораторных 36 ч., ИКР 0,5 часа, 80,8 часов самостоятельной работы).

Цель дисциплины:

- обучить студентов владению основными положениями и теорем теории групп, применяемых при исследованиях атомных и молекулярных систем.
- подготовить к практическому использованию различных приложений теории групп в химии: определение термов молекул, правила отбора, теория колебаний, протекание химических реакций.

Задачи дисциплины:

- студенты должны познакомиться с основными положениями и теоремами теории групп симметрии.
- получить представление об основных группах симметрии (точечные группы и группы перестановок), используемыми при изучении атомных и молекулярных систем.
- научиться грамотно применять полученные знания при решении ряда задач, возникающих при исследованиях строения молекул. Например: классификация электронных термов атомов и молекул; определение симметрии нормальных колебаний молекулы и их активности в ИК и КР спектрах; определение симметрии возможной геометрической конфигурации молекулы и т.д.

Место дисциплины в структуре образовательной программы

Курс «Теория групп в химии» относится к вариативной части Блока Б1 «Дисциплины (модули)» (Б1.В.ДВ.01.01). Для его изучения необходимо предварительное изучение курсов бакалавриата Б1.Б.12 Неорганическая химия, Б1.Б.09 «Кристаллография» и Б1.В.03 «Строение вещества».

Знания и навыки, полученные в результате освоения данного курса, могут быть использованы при решении различных задач общеобразовательных и специальных химических дисциплин, изучении дисциплин Компьютерное моделирование структур молекул и химических процессов, Молекулярная спектроскопия координационных соединений, в научно-исследовательской работе студентов.

Требования к уровню освоения дисциплины

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций: ОК-1, ОПК-1, ПК-1.

перечислить компетенции

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
1	ОК-1	способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу	основные приемы анализа и синтеза, основные категории формальной логики	абстрактно мыслить, использовать методы анализа и синтеза в научной работе, со-	способностью анализировать разнородные экспериментальные факты, обобщать значи-

				относить теоретические положения с экспериментальными данными	тельное число данных, осмыслять теоретические положения
2	ОПК-1	способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	Основные понятия групп симметрии (точечные группы и группы перестановок), используемых при изучении атомных и молекулярных систем	грамотно применять полученные знания при решении ряда задач, возникающих при исследованиях строения молекул.	Методологией теории групп и ее приложений к изучению атомных и молекулярных систем
3	ПК-1	способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты	Основные принципы планирования научного исследования.	самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты	приемами осмысления базовой и факультативной информации для решения научно-исследовательских и производственных задач в сфере профессиональной деятельности

Основные разделы дисциплины:

Разделы дисциплины, изучаемые в 9 семестре (для студентов ОФО)

№	Наименование разделов (тем)	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа
			Л	ПЗ	ЛР	СРС
1	2	3	4	5	6	7
1.	Введение. Операции с векторами и матрицами.	22	4		2	16
2.	Основы теории групп. Точечные группы симметрии.	48	12		12	24
3.	Электронные состояния молекул. Колебания молекул.	46	10		12	24
4.	Влияние симметрии на протекание химических реакций.	36,8	10		10	16,8
	Итого по дисциплине:	152,8	36		36	80,8

Курсовые работы: *не предусмотрены*

Форма проведения аттестации по дисциплине: зачет и экзамен в 9 семестре.

Основная литература:

1. Грибов Л.А. Элементы квантовой теории строения и свойств молекул. – Интеллект, 2010, 312 с.
2. Сизова О. В., Иванова Н. В., Ванин А. А. Молекулярная симметрия в неорганической и координационной химии. - Изд. 2-е, перераб. и доп. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2016. - 272 с. ЭБС: <https://e.lanbook.com/book/76285#authors>

Автор (ы) РПД _____ Волынкин В.А.
Ф.И.О.