

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Кубанский государственный университет»
Факультет химии и высоких технологий

УТВЕРЖДАЮ:

Проректор по учебной работе,
качеству образования – первый
проректор

Иванов А.Г.

«30»

2017г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Б1.В.ДВ.01.01 ТЕОРИЯ ГРУПП В ХИМИИ

Направление подготовки - 04. 04.01 Химия

Направленность (профиль) - Неорганическая химия

Программа подготовки - академическая

Форма обучения - очная

Квалификация (степень) выпускника - магистр

Краснодар 2017

Рабочая программа дисциплины ТЕОРИЯ ГРУПП В ХИМИИ составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 04.04.01 – Химия (профиль Неорганическая химия) №1042 от 23 сентября 2015 г. (Зарегистрирован в Минюсте 19 октября 2015 г. № 39357)

Программу составил

Волынкин В.А., доцент кафедры общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии, к.х.н. 

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры общей, неорганической химии и ИВТ в химии (разработчика) протокол № 7 «22» июня 2017 г.

Заведующий кафедрой
д.х.н., профессор

 Буков Н.Н.

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры общей, неорганической химии и ИВТ в химии (выпускающей) протокол № 7 «22» июня 2017 г.

Заведующий кафедрой
д.х.н., профессор

 Буков Н.Н.

Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии и высоких технологий, протокол № 5 «27» июня 2017 г.

Председатель УМК факультета Стороженко Т.П.



Рецензенты:

Крапивин Г.Д., профессор кафедры биоорганической химии
ФГБОУ ВО «КубГТУ», д.х.н., профессор

Болотин С.Н., доцент кафедры экологии и природопользования
ФГБОУ ВО «КубГУ», к.х.н, доцент

Рабочая программа учебной дисциплины

«Теория групп в химии»

**для студентов факультета химии и высоких технологий
направление подготовки 04.04.01 – Химия
(профиль Неорганическая химия)**

1. Цели и задачи освоения дисциплины

1.1 Цель дисциплины

- обучить студентов владению основными положениями и теорем теории групп симметрии, 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.

1.2. 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.

1.3 Место дисциплины (модуля) 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.

1.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Изучение данной учебной дисциплины направлено на формирование у обучающихся следующих общекультурных и профессиональных компетенций: ОК-1, ОПК-1, ПК-1.

№ 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, соотносить теоретические положения с экспериментальными данными	способностью анализировать разнородные экспериментальные факты, обобщать значительное число данных, осмысливать 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 исследовании 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 при-	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 профессио-

		кладные ре- зультаты			нальной дея- тельности
--	--	-------------------------	--	--	---------------------------

2. Структура и содержание дисциплины

2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 5 зач. ед. (180 часов), их распределение по видам работ представлено в таблице.

Вид учебной работы		Всего часов	Семестры (часы)			
			5			
Контактная работа, в том числе:						
Аудиторные занятия (всего):		72	72			
Занятия лекционного типа		36	36	-	-	-
Лабораторные занятия		36	36	-	-	-
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)		-	-	-	-	-
		-	-	-	-	-
Иная контактная работа:						
Контроль самостоятельной работы (КСР)		-	-			
Промежуточная аттестация (ИКР)		0,5	0,5			
Самостоятельная работа, в том числе:						
<i>Курсовая работа</i>		-	-	-	-	-
<i>Проработка учебного (теоретического) материала</i>		56	56	-	-	-
<i>Выполнение индивидуальных заданий (подготовка сообщений, презентаций)</i>		20	20	-	-	-
<i>Реферат</i>		4,8	4,8	-	-	-
Подготовка к текущему контролю				-	-	-
Контроль:						
Подготовка к экзамену		26,7	26,7			
Общая трудоемкость	час.	180	180	-	-	-
	в том числе контактная работа	72,5	72,5			
	зач. ед	5	5			

2.2 Структура дисциплины.

Распределение видов учебной работы и их трудоёмкости по разделам дисциплины.

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

№	Наименование разделов (тем)	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа
			Л	ПЗ	ЛР	
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

2.3 Содержание разделов дисциплины

2.3.1 Занятия лекционного типа

№ раздела	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1	Основы теории групп	Операции с векторами и матрицами. Операции симметрии, применяемые к молекуле. Определение группы. Основные теоремы теории групп. Точечные группы симметрии. Обозначения групп. Матричные представления генераторов. Неприводимые представления. Группы симметрии нежестких молекул.	Коллоквиум
2	Электронные состояния молекул.	Классификация термов атомов. Теория кристаллического поля. Расщепление атомных уровней в кристаллическом поле. Классификация электронных состояний нелинейных молекул. Определение симметрии электронной волновой функции линейных молекул. Электронные состояния нелинейных молекул, вырожденные для высокосимметричных конфигураций ядер. Эффект Реннера-Теллера. Эффект Яна-Теллера.	Рефераты, доклады
3	Колебания мо-	Метод локальной симметрии. Опреде-	Проверка и

	лекул.	ление колебательного представления произвольной многоатомной молекулы. Представления оператора дипольного момента и правила отбора. Правила отбора в ИК- и КР-спектрах. Построение симметризованных координат.	анализ индивидуальных разработок
4	Влияние симметрии на протекание химических реакций.	Определение симметрии возможного переходного состояния. Определение путей возможных внутримолекулярных перегруппировок.	Коллоквиум с докладами в виде презентации.

2.3.2 Занятия семинарского типа

(учебным планом занятия семинарского типа не предусмотрены)

2.3.3 Лабораторные занятия

№	Наименование лабораторных работ	Форма текущего контроля
1	3	4
1.	Операции с матрицами и векторами. Преобразование координат атомов в молекуле при выполнении различных операций симметрии.	<i>Отчет по лаб. работе</i>
2.	Определение элементов симметрии заданной молекулы. Построение таблицы произведения элементов симметрии. Нахождение генераторов и обозначение группы. Выделение сопряженных элементов и классов группы. Построение таблицы характеров неприводимых представлений группы.	<i>Отчет по лаб. работе</i>
3.	Группы перестановок. Определение классов группы. Построение диаграмм Юнга, хук-диаграмм и таблицы характеров.	<i>Решение задач</i>
4.	Контрольная работа №1.	<i>КР</i>
5.	Определение симметрии электронных термов атомов и линейных молекул. Эффект Реннера-Теллера.	<i>Отчет по лаб. работе</i>
6.	Определение на основе теории кристаллического симметрии МО и электронного состояния молекул фторидов d-металлов для высокосимметричных конфигураций ядер. Эффект Яна-Теллера.	<i>Отчет по лаб. работе</i>
7.	Определение колебательного представления, построение координат симметрии и определение активных колебаний в ИК- и КР-спектрах для произвольной многоатомной молекулы.	<i>Коллоквиум с докладами в виде презентации.</i>
8.	Самостоятельная работа №2	<i>КР</i>

2.3.4 Примерная тематика курсовых работ

Курсовые работы – не предусмотрены

2.4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

№	Вид СРС	Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины по выполнению самостоятельной работы
1	2	3
1	Теоретическая самоподготовка	Методические рекомендации к организации аудиторной и внеаудиторной (самостоятельной) работы студентов: методические указания / сост. Т.П. Стороженко, Т.Б. Починок, А.В. Беспалов, Н.В. Лоза. – Краснодар: Кубанский гос. ун-т, 2018. 89 с. Интернет ресурсы по дисциплине, в том числе указанные в п.6.
2	Подготовка к ЛР	
3	Реферат	
4	Доклады, презентации	

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья (ОВЗ) предоставляются в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

- в печатной форме увеличенным шрифтом,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями слуха:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

3. Образовательные технологии

Для формирования профессиональных компетенций в процессе освоения курса используется технология профессионально-развивающего обучения, предусматривающая не только передачу теоретического материала, но и стимулирование и развитие продуктивных познавательных действий студентов (на основе психолого-педагогической теории поэтапного формирования умственных действий).

Активизации и интенсификации познавательного процесса способствуют моделирование проблемных ситуаций, мультимедийные презентации в лекционном курсе. В рамках лабораторных занятий применяются методы проектного обучения, исследовательские методы, тренинговые формы, метод конкретных ситуаций. В процессе самостоятельной деятельности студенты осваивают и анализируют передовой опыт, используя имеющуюся литературу и информационные технологии, посещают предприятия, выступают с презентациями, накапливают портфолио разработок.

Семестр	Вид занятия (Л, ПР, ЛР)	Используемые интерактивные образовательные технологии	Количество часов
А	ЛР	Беседы, разбор ситуаций, работа в малых группах	4
	ЛР	презентация рефератов (разработок) в формате мини-конференции	12
<i>Итого:</i>			16

4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Текущий контроль осуществляется в устной и электронной форме в процессе выполнения лабораторных работ. Промежуточный контроль проводится в виде тестов и контрольных работ. Итоговый контроль осуществляется приемом зачета и экзамена.

Оценочные средства для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья выбираются с учетом их индивидуальных психофизических особенностей.

– при проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями;

– при необходимости для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине (модулю) предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

- в печатной форме увеличенным шрифтом,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями слуха:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся. Фонд оценочных средств оформляется как отдельное приложение к рабочей программе.

4.1 Фонд оценочных средств для проведения текущей аттестации

4.1.1 Примерные темы рефератов, докладов, эссе

1. Классификация термов атомов. Теория кристаллического поля. Расщепление атомных уровней в кристаллическом поле. Анализ расщепления

- d - и f -уровней в полях различной симметрии. Цис- и транс-влияние в комплексах переходных металлов.
2. Электронные состояния молекул. Классификация электронных состояний нелинейных молекул. Определение симметрии электронной волновой функции линейных молекул. Электронные состояния нелинейных молекул, вырожденные для высокосимметричных конфигураций ядер. Эффект Реннера-Теллера. Эффект Яна-Теллера.
 3. Колебания молекул. Метод локальной симметрии. Определение колебательного представления произвольной многоатомной молекулы. Представления оператора дипольного момента и правила отбора. Правила отбора в ИК- и КР-спектрах. Построение симметризованных координат.
 4. Влияние симметрии на протекание химических реакций. Определение симметрии возможного переходного состояния. Определение путей возможных внутримолекулярных перегруппировок.
 5. Кристаллы и квазикристаллы. Основные типы химической связи в кристаллах. Гомодесмические и гетеродесмические структуры. Критерий устойчивости структур. Кристаллические структуры координационных соединений. Общая характеристика молекулярных кристаллов. Особенности органических кристаллов.

4.1.2 Примеры вариантов контрольных работ, тестов

Текущий контроль осуществляется в устной и электронной форме в процессе выполнения лабораторных работ. Промежуточный контроль проводится в виде тестов и контрольных работ. Итоговый контроль осуществляется приемом экзамена.

ВАРИАНТ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ № 1

Генераторами группы симметрии дихлорметана являются C_2 и σ_v ; для трехфтористого бора это C_3 , ось C_2 , перпендикулярная C_3 , плоскость симметрии σ_h , перпендикулярная C_3 ; для циклогексана в конформации кресла – C_3 , ось C_2 , перпендикулярная C_3 и плоскость симметрии σ_d , содержащая C_3 и делящая пополам пару осей C_2 . Проверить, что все указанные элементы симметрии являются генераторами группсимметрии соответствующих молекул.

4.2 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

4.2.1 Вопросы для подготовки к зачету

1. Операции симметрии, применяемые к молекуле. Определение группы.
2. Основные теоремы теории групп. Генераторы, подгруппы, сопряженные элементы и классы.
3. Точечные группы симметрии. Обозначения групп.

4. Матричные представления генераторов. Неприводимые представления. Построение таблиц характеров.
5. Редукция приводимых представлений. Метод проекционных операторов.
6. Электронные состояния молекул. Классификация электронных состояний нелинейных молекул.
7. Определение симметрии электронной волновой функции линейных молекул.
8. Классификация термов атомов.

4.2.2 Вопросы для подготовки к экзамену

1. Операции с векторами и матрицами. Преобразование базиса. Вращение векторов.
2. Операции симметрии, применяемые к молекуле. Определение группы. Основные теоремы теории групп. Генераторы, подгруппы, сопряженные элементы и классы.
3. Точечные группы симметрии. Обозначения групп. Матричные представления генераторов. Неприводимые представления. Построение таблиц характеров.
4. Редукция приводимых представлений. Метод проекционных операторов.
5. Некоторые специальные группы. Трехмерная группа поворотов и отражений. Симметрическая группа перестановок. Группы симметрии нежестких молекул.
6. Классификация термов атомов.
7. Теория кристаллического поля. Расщепление атомных уровней в кристаллическом поле.
8. Электронные состояния молекул. Классификация электронных состояний нелинейных молекул. Определение симметрии электронной волновой функции линейных молекул.
9. Электронные состояния нелинейных молекул, вырожденные для высокосимметричных конфигураций ядер. Эффект Реннера-Теллера. Эффект Яна-Теллера.
10. Колебания молекул. Метод локальной симметрии. Определение колебательного представления произвольной многоатомной молекулы.
11. Представления оператора дипольного момента и правила отбора. Правила отбора в ИК- и КР-спектрах. Построение симметризованных координат.
12. Влияние симметрии на протекание химических реакций. Определение симметрии возможного переходного состояния.
13. Определение путей возможных внутримолекулярных перегруппировок.
14. Расчет структуры и энергии молекул.
15. Расчет спектральных характеристик молекул.

4.2.3 Примеры экзаменационных билетов



Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Кубанский государственный университет»

Направление 04.04.01 «Химия»

Кафедра общей, неорганической химии и ИВТ в химии

Дисциплина: «Теория групп в химии»

БИЛЕТ №3

1. Классификация термов атомов.
2. Электронные состояния нелинейных молекул, вырожденные для высокосимметричных конфигураций ядер. Эффект Реннера-Теллера. Эффект Яна-Теллера.

*Зав. кафедрой,
д.х.н., профессор*

Н.Н. Буков

5. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

5.1 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>

5.2 Дополнительная литература

1. Артамонов В.А. Словохотов Ю.Л. Группы и их приложения в физике, химии, кристаллографии.- М.: Академия, 2005, 512 с.
2. Крашенинин В.И., Газенаур Е.Г., Кузьмина Л.В. Симметрия в химии : учебное пособие /. - Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2013. - 80 с. ЭБС: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232679>.
3. Петрашень М. И., Трифонов Е. Д. Применение теории групп в квантовой механике. - Изд. 5-е. - М. : URSS : [ЛИБРОКОМ], 2010. - 279 с

5.3 Периодические издания

Периодические журналы: Журнал структурной химии; Координационная химия.

6. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля)

1. Электронная библиотечная система издательства "Лань".
2. Научная электронная библиотека (НЭБ).
3. Электронная библиотечная система BOOK.ru .
4. Коллекция журналов издательства Elsevier на портале ScienceDirect.
5. <http://www.gaussian.com>
6. <http://www.qchem.ru/>
7. <http://www.msg.ameslab.gov/games/>
8. <http://quant.distant.ru>

7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Методические указания и рекомендации к созданию презентации по теме магистерской работы для устных и стендовых научных докладов.

При создании мультимедийной презентации следует руководствоваться следующими принципами:

- Прежде чем приступить к работе над презентацией, следует добиться полного понимания того, о чем вы собираетесь рассказывать.
- Презентация должна быть краткой, доступной и композиционно целостной.
- В презентации не должно быть ничего лишнего. Каждый слайд должен представлять собой необходимое звено повествования и работать на общую идею презентации.
- Продолжительность презентации со сценарием должна составлять не более 20-30 минут. Для демонстрации нужно подготовить примерно 20-25 слайдов (показ одного слайда занимает около 1 минуты, плюс время для ответов на вопросы слушателей).
- Не перегружайте слайды лишними деталями. Иногда лучше вместо одного сложного слайда представить несколько простых. Не следует пытаться "затолкать" в один слайд слишком много информации.
- Спецэффекты должны быть сведены к минимуму и использованы только с целью привлечь внимание зрителя к ключевым моментам демонстрации.
- Необходимо поддерживать единый стиль представления информации.
- Шрифты рекомендуется использовать стандартные - Times, Arial. Лучше всего ограничиться использованием двух или трех шрифтов для всей презентации.
- Вся презентация выполняется в одной цветовой палитре, обычно на базе одного шаблона.
- Информация должна быть по возможности представлена в виде графиков, схем, таблиц или списков.

Лабораторные работы

Рекомендации:

- руководствоваться графиком лабораторных работ РПД;
- накануне перед очередной работой необходимо по конспекту или в методических указаниях к работе просмотреть теоретический материал работы;
- на лабораторном занятии, выполнив все опыты и расчеты, необходимо проанализировать окончательные результаты и убедиться в их достоверности;
- обратить внимание на оформление отчета, в котором должны присутствовать: цель работы, схема установки или ее математическая модель, журнал опытных и расчетных данных, реализация в опыте и расчетах цели работы, необходимые графические зависимости (при их наличии) и их анализ, результаты работы и выводы;
- при подготовке к отчету руководствоваться вопросами, приведенными в методических указаниях к данной работе, тренажерами программ на ЭВМ по отчету работ и компьютерным учебником.

Указания по самостоятельной работе.

Самостоятельная работа составляет не менее 50% от времени, отводимого на изучение дисциплины. При самостоятельной работе студент должен ознакомиться с основными учебниками и учебными пособиями, дополнительной литературой и иными доступными литературными источниками. При работе с литературой по конкретным темам курса, в том числе указанным для самостоятельной проработки. Основное внимание следует уделять важнейшим понятиям, терминам, определениям, для скорейшего усвоения которых целесообразно вести краткий конспект.

Методические рекомендации преподавателям по методике проведения основных видов учебных занятий

Лекции

Методика чтения лекций

Лекции являются одним из основных методов обучения по дисциплине, которые должны решать следующие задачи:

- изложить важнейший материал программы курса, освещающий основные моменты;
- развить у студентов потребность к самостоятельной работе над учебной и научной литературой.

Главной задачей каждой лекции является раскрытие сущности темы и анализ ее главных положений. Рекомендуется на первой лекции довести до внимания студентов структуру курса и его разделы, а в дальнейшем указывать начало каждого раздела, суть и его задачи, а, закончив изложение, подводить итог по этому разделу, чтобы связать его со следующим.

Содержание лекций

Содержание лекций определяется рабочей программой курса. Крайне желательно, чтобы каждая лекция охватывала и исчерпывала определенную тему курса и представляла собой логически вполне законченную работу. Лучше сократить тему, но не допускать перерыва ее в таком месте, когда основная идея еще полностью не раскрыта.

Лабораторные занятия

Методика проведения лабораторных занятий

Целями проведения лабораторных работ являются:

- установление связей теории с практикой в форме экспериментального подтверждения положений теории;
- обучение студентов умению анализировать полученные результаты;
- контроль самостоятельной работы студентов по освоению курса;
- обучение навыкам профессиональной деятельности

Цели лабораторного практикума достигаются наилучшим образом в том случае, если выполнению эксперимента предшествует определенная подготовительная внеаудиторная работа. Поэтому преподаватель обязан довести до всех студентов график выполнения лабораторных работ с тем, чтобы они могли заниматься целенаправленной домашней подготовкой.

Перед началом очередного занятия преподаватель должен удостовериться в готовности студентов к выполнению лабораторной работы путем короткого собеседования и проверки наличия у студентов заготовленных протоколов проведения работы.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю) (при необходимости)

8.1 Перечень необходимого программного обеспечения

В курсе лабораторных работ используется следующее программное обеспечение: Microsoft Windows, ACD Labs Chems sketch freeware, GAMESS, HyperChem 8.0, МОРАС.

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

№	Вид работ	Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля) и оснащенность
1.	Лекционные занятия	Лекционная аудитория, оснащенная: комплект учебной мебели, доска интерактивная SMART Board с короткофокусным проектором, ноутбук. (ауд. 422С).

№	Вид работ	Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля) и оснащенность
2.	Лабораторные занятия	Компьютерный зал с терминальными станциями с операционной системой Windows 7 или более поздней версии и необходимым программным обеспечением (ауд. 103).
3.	Групповые (индивидуальные) консультации	Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций, оснащенная комплектом учебной мебели, доской интерактивной SMART Board с короткофокусным проектором, ноутбуком. (ауд. 422С).
4.	Текущий контроль, промежуточная аттестация	Учебная аудитория для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная комплектом учебной мебели, доской интерактивной SMART Board с короткофокусным проектором, ноутбуком. (ауд. 422С).
5.	Самостоятельная работа	Помещение для самостоятельной работы студентов, оснащенное учебной мебелью, компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспеченное доступом в электронную информационно-образовательную среду университета. (ауд. 401с, 431с)