

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
Кафедра теоретичної хімії

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Перший проректор

“ _____ ” _____ 20__ р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Теоретико-групові методи в хімії

напряму підготовки 0703 хімія
для спеціальності 8.070301 хімія
спеціалізації „Комп’ютерна хімія і молекулярний дизайн”
хімічного факультету

Кредитно-модульна система
організації навчального процесу

Харків

Робоча програма навчальної дисципліни „Теоретико-групові методи в хімії” для студентів за напрямом підготовки 0703 хімія, спеціальністю 8.070301 хімія.

Розробники: **Стародуб Володимир Олександрович, д.х.н., професор кафедри теоретичної хімії, Зіolkовський Дмитро Володимирович, к.х.н., ст. викл. кафедри теоретичної хімії**

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри теоретичної хімії

Протокол № _____ р.

Завідувач кафедри _____ А. М. Жолновач

Схвалено методичною комісією хімічного факультету

Протокол № ____ від “ ____ ” _____ 20__ р.

“ ____ ” _____ 20__ р.

Голова _____

О.І. Юрченко

1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни
		денна форма навчання
Кількість кредитів 1.5	Напрямок підготовки 0703 хімія	за вибором
Модулів – 2	Спеціальність 8.070301 хімія	Рік підготовки: 4 -й
Загальна кількість годин 64		Семестр 8 -й
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 2 самостійної роботи студента – 2	Освітньо-кваліфікаційний рівень: бакалавр	Лекції 16 год.
		Практичні 16 год.
		Самостійна робота 32 год.
		Вид контролю: іспит

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Мета: надати теоретичні основи сучасних спектральних досліджень хімічних сполук та кристалів, квантово-хімічних розрахунків з врахуванням симетрії, аналізу механізмів хімічних реакцій в рамках теорії збереження орбітальної симетрії.

У результаті вивчення даного курсу студент повинен

знати: елементи формальної теорії скінчених груп та їх лінійних зображень й основи практичного використання симетрії для аналізу оптичних (інфрачервоних, електронних) спектрів молекул та кристалів; дослідження міжмолекулярної взаємодії, та вивчення зв'язку електрофізичних властивостей твердих тіл з їх оптичними властивостями.

вміти: застосовувати апарат теорії груп для вирішення задач спектроскопії та аналізу фізичних властивостей твердих тіл і молекулярних систем.

3. Програма навчальної дисципліни

Модуль 1.

Тема 1. Елементи формальної теорії груп.

Тема 2. Крапкові групи. Приклади крапкових груп.

Тема 3. Групи матриць.

Модуль 2.

Тема 4. Теорія лінійних зображень.

Тема 5. Композиції зображень.

Тема 6. Застосування теорії зображень скінчених груп.

Тема 7. Застосування теорії груп до проблем спектроскопії.

4. Структура навчальної дисципліни

Модулі і теми	Кількість годин				
	Денна форма				
	Усього	у тому числі			
л		п	лаб	ср	
1	2	3	4	5	6
Модуль 1					
Тема 1	8	2	2		4
Тема 2	10	3	2		5
Тема 3	8	2	2		4
Разом за модулем 1	26	7	6		13
Модуль 2					
Тема 4	10	2	3		5
Тема 5	8	2	2		4
Тема 6	8	2	2		4
Тема 7	12	3	3		6
Разом за модулем 2	38	9	10		19
Усього годин	64	16	16		32

5. Теми практичних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Елементи формальної теорії груп	4
2	Крапкові групи молекул	3
3	Групи матриць; лінійні зображення	3
4	Задачі по коливальним спектрам молекул та іонів: аналіз частот і форм нормальних коливань; класифікація їх за симетрією; побудова координат симетрії за методом оператора проектування.	3
5	Задачі по електронним спектрам молекул: класифікація електронних станів; побудова групових орбіталей; аналіз імовірності електронних переходів.	3

6. Самостійна робота

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Сполучені елементи й класи; інваріантна підгрупа; фактор-група. Гомоморфізм і ізоморфізм груп. Властивості гомоморфізму. Прямий добуток груп.	4
2	Крапкові групи. Приклади крапкових груп.	4
3	Групи матриць. Групи квадратних неособливих матриць; матриці крапкових перетворень координат; деякі спеціальні види матриць;	4

	скалярний добуток.	
4	Теорія лінійних зображень. Зображення групи; приклади зображень. Зображення групи симетрії рівняння Шредингера. Звідні та незвідні зображення. Перша та друга леми Шура.	4
5	Співвідношення ортогональності. Характери зображень. Регулярне зображення. Число нееквівалентних незвідних зображень. Обчислення характеристик незвідних зображень.	6
6	Композиції зображень. Незвідні зображення прямого добутку груп. Прямий (кронекеровський) добуток зображень. Симетризований і антисиметризований добуток зображень. Базисні функції незвідних зображень. Теорема Вігнера.	6
7	Застосування теорії зображень скінчених груп. Застосування теорії груп до проблем коливальної спектроскопії. Побудова симетризованих зсувів (координат симетрії). Електронні спектри поглинання. Класифікація станів.	4

7. Методи навчання

Елементи проблемних лекцій; індивідуальні завдання для самостійної роботи; моделювання професійних ситуацій при вирішенні задач щодо інтерпретації спектральних даних.

8. Методи контролю

Усний контроль, письмові роботи, залік.

9. Розподіл балів, які отримують студенти

Поточне тестування та самостійна робота							Підсумковий семестровий контроль (екзамен)	Сума
Модуль 1			Модуль 2				40	100
T1	T2	T3	T4	T5	T6	T7		
10	10	10	10	10	5	5		

Для зарахування кожного з модулів студент має набрати не менше, ніж 50% балів за кожною з тем. Для одержання допуску до підсумкового семестрового контролю студент повинен виконати всі лабораторні роботи, написати контрольні роботи і набрати не менше 40 балів.

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою
90 – 100	A	зараховано
80-89	B	
70-79	C	
60-69	D	
50-59	E	

1-49	FX	незараховано
------	-----------	--------------

10. Методичне забезпечення

1. Робоча програма навчальної дисципліни.
2. Навчальні посібники, монографії, наукові статті.
3. Електронні конспекти лекцій.

11. Рекомендована література

Базова

1. Р. Хохштрассер. Молекулярне аспекты симметрии. – М., Мир, 1968. 384 с.
2. Вудворд Р., Хоффман Р. Сохранение орбитальной симметрии. – М., Мир, 1971. 207 с.
3. Стародуб В. А., Слета Л. А. Элементарное введение в теорию групп. Харьков: ХГУ, 1981, 72 с.
4. Стародуб В. А. Применение теории групп в химии. Харьков: ХГУ, 1987, 94 с.

Допоміжна

1. Хамермеш М. Теория групп и её применение к физическим проблемам. – М., Мир, 1966. 588 с.
2. Фларри Р. Группы симметрии. Теория и химические приложения. – М., Мир, 1983. 396 с.
5. Драго Р. Физические методы в химии, в 2-х томах. М., Мир, 1981 г.