

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Рабочая программа дисциплины

Теория групп симметрии

Образовательная программа
04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»

Профиль подготовки
Физическая химия

Уровень высшего образования
Специалитет

Форма обучения
Очная

Статус дисциплины: входит в часть, формируемую участниками
образовательных отношений

Махачкала, 2021 г.

Рабочая программа дисциплины “Теория групп симметрии” составлена в 2021 году в соответствии с требованиями ФГОС ВО по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия (уровень специалитета)

от «13» июля 2017 г: № 652.

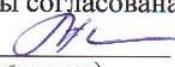
Разработчики: кафедра физической и органической химии, Шабанов Осман Мехтиевич, д.х.н., профессор

Рабочая программа дисциплины одобрена:
на заседании кафедры физической и органической химии
от «18» 05 2021 г., протокол № 2.

Зав.кафедрой  Абдулагатов И. М.
(подпись)

на заседании Методической комиссии химического факультета
от «18» 06 2021 г., протокол № 10.

Председатель  Гасангаджиева У.Г.
(подпись)

Рабочая программа дисциплины согласована с учебно-методическим управлением
«9» июня 2021 г. 
(подпись)

Аннотация рабочей программы дисциплины

Дисциплина “Теория групп симметрии” входит в часть, формируемую участниками образовательных отношений, ОПОП специалитета по специальности 04.05.01 - Фундаментальная и прикладная химия.

Дисциплина реализуется на химическом факультете кафедрой физической и органической химии.

Курс по выбору “Теория групп симметрии” предназначен на освоение студентами основных положений теории геометрического строения молекул, математической теории групп и на основе – теории групп симметрии молекул, возможностей их применения в химии. В данном курсе основное внимание уделяется на установление точечных групп симметрии молекул, характеров неприводимых представлений степеней свободы молекул, симметрии колебаний и электронных состояний, построение молекулярных орбиталей симметрии, установление правил отбора во всех видах молекулярной спектроскопии.

Дисциплина нацелена на формирование следующих общепрофессиональных и профессиональных компетенций выпускника: ОПК-6, ПК-1, ПК-2, ПК-3, ПК-4, ПК-5.

Преподавание дисциплины предусматривает проведение следующих видов учебных занятий: *лекции, практические занятия.*

Рабочая программа дисциплины предусматривает проведение следующих видов контроля успеваемости в форме *отчетов по практическим работам, контрольных работ и коллоквиумов, устный опрос, письменный опрос, тестирование* и промежуточный контроль в форме **зачета**.

Объем дисциплины 2 зачетные единицы, в том числе в академических часах по видам учебных занятий 72 часа

Се- местр	Учебные занятия в том числе						СРС, в том числе экза- мен	Форма проме- жуточной атте- стации (зачет, дифференциро- ванный зачет, экзамен
	Контактная работа обучающихся с преподавателем							
	Все го	из них						
9	72	Лек- ции 18	Лабора- торные занятия -	Практи- ческие занятия 50	КСР -	кон- сульты- ции -	4	Зачет

1. Цели освоения дисциплины

Курс по выбору “Теория групп симметрии” предназначен на освоение студентами основных положений теории геометрического строения молекул, математической теории групп и на основе – теории групп симметрии молекул, возможностей их применения в химии. В данном курсе основное внимание уделяется на установление точечных групп симметрии молекул, характеров неприводимых представлений степеней свободы молекул, симметрии колебаний и электронных состояний, построение молекулярных орбиталей симметрии, установление правил отбора во всех видах молекулярной спектроскопии, необходимых для эффективного освоения основной образовательной программы по специальности 04.05.01 – ФиПХ.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП специалитета

Дисциплина “Теория групп симметрии ” входит в часть, формируемую участниками образовательных отношений, ОПОП специалитета по специальности 04.05.01 - Фундаментальная и прикладная химия.

Цели освоения дисциплины достигаются на основе фактического материала предшествующих курсов «Математика», «Физика», «Квантовая механика и квантовая химия», «Физическая химия», «Кристаллохимия», она служит основой при изучении курса «Физические методы исследования».

Теория групп является одной из мощных математических инструментов, используемых в квантовой химии и спектроскопии. Это позволяет пользователю предсказать, интерпретировать и рационализировать сложные теории и данные.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (перечень планируемых результатов обучения)

Код и наименование компетенции из ОПОП	Код и наименование индикатора достижения компетенций (в соответствии с ОПОП)	Планируемые результаты обучения	Процедура освоения
ОПК-6 способен представлять результаты профессиональной деятельности в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе	ОПК-6.1 Грамотно составляет отчет о проделанной работе в письменной форме	Знает: требования к рабочему журналу химика; правила составления протоколов отчетов химических опытов; требования к представлению результатов исследований в виде курсовых и квалификационных работ. Умеет: представить результаты опытов и расчетных работ согласно требованиям в данной области химии; представить результаты химических исследований в соответствии с требованиями к квалификационным работам. Владеет: опытом представления результатов экспериментальных и расчетно-теоретических работ в виде протоколов испытаний, отчетов, курсовых и квалификационных работ	Устный опрос, письменный опрос
	ОПК-6.2 Представляет результаты работы в виде научной публикации (тезисы доклада, статья, обзор) на русском и английском языке	Знает: требования к тезисам и научным статьям химического профиля; Умеет: составить тезисы доклада и отдельные	

		<p>разделы статьи на русском и английском языке</p> <p>Владеет: навыками представления результатов собственных научных изысканий в компьютерных сетях и информационной научно-образовательной среде</p>	
	<p>ОПК-6.3 Представляет результаты работы в устной форме на русском и английском языке</p>	<p>Знает: грамматику, орфографию и орфоэпию русского и английского языка.</p> <p>Умеет: представить результаты исследований в виде постера; формулировать вопросы к членам профессионального сообщества и отвечать на вопросы по теме проведенного исследования; грамотно и логично изложить результаты проделанной работы в устной форме на русском и английском языке.</p> <p>Владеет: свободно русским и английским языком.</p>	
<p>ПК-1. Способен проводить сбор, анализ и обработку литературных данных для решения поставленной задачи в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией наук</p>	<p>ПК-1.1. Собирает информацию по тематике научного проекта в выбранной области химии с использованием открытых источников информации и специализированных баз данных</p>	<p>Знает: Знает перечень открытых источников информации и специализированных баз данных в области аналитической химии.</p> <p>Умеет: Пользоваться электронными ресурсами и базами данных, а так же периодическими изданиями в области аналитической химии.</p> <p>Владеет: навыками сбора информации по тематике научного проекта в области аналитической химии с использованием открытых источников информации и специализированных</p>	<p>Устный опрос, письменный опрос</p>

		баз данных, в том числе Scopus и Web of Science.	
	ПК-1.2. Анализирует и обрабатывает литературные данные по тематике исследования в выбранной области химии	Знает: знает методы систематизации и классификации литературных данных по тематике исследования в области аналитической химии. Умеет: систематизировать и классифицировать литературные данные по тематике исследования в области аналитической химии. Владеет: навыками систематизации и классификации литературных данных по тематике исследования в области аналитической химии.	
ПК-2. Способен планировать работу и выбирать методы решения поставленных задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	ПК-2.1. Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий.	Знает: методы составления планов отдельных стадий и общего плана исследования в области аналитической химии. Умеет: составлять планы отдельных стадий и общий плана исследования в области аналитической химии. Владеет: навыками составляет общего плана исследования в области аналитической химии и детальных планов отдельных стадий.	Устный опрос, письменный опрос
	ПК-2.2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов.	Знает: экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи в области аналитической химии. Умеет: выбирать экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи в области аналитической химии исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов.	

		Владеет: навыками выбора экспериментальных и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя в области аналитической химии из имеющихся материальных и временных ресурсов.	
	ПК-2.3. Планирование и проведение научно-исследовательских работ по разработке и внедрению нормативных документов по системам стандартизации, разработки и постановки продукции на производство.	Знает: методы нормативные документы по системам стандартизации, разработки и постановки продукции на производство. Умеет: планировать и проводить научно-исследовательские работы по разработке и внедрению нормативных документов по системам стандартизации, разработки и постановки продукции на производство. Владеет: навыками планирования и проведения научно-исследовательских работ по разработке и внедрению нормативных документов по системам стандартизации, разработки и постановки продукции на производство.	Устный опрос, письменный опрос
ПК-3. Способен проводить экспериментальные и расчетно-теоретические работы по заданной теме в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	ПК-3.1. Проводит экспериментальные исследования по заданной теме в выбранной области химии	Знает: методы проведения экспериментальных исследований по заданной теме в области аналитической химии. Умеет: проводить экспериментальные исследования по заданной теме в области аналитической химии. Владеет: навыками проведения экспериментальных исследований под руководством руководителя по задан-	Устный опрос, письменный опрос, сдача лабораторных работ

		ной теме в области аналитической химии.	
	ПК-3.2. Проводит расчетно-теоретические исследования по заданной теме в выбранной области химии	Знает: методы расчетно-теоретических исследований по заданной теме в области аналитической химии. Умеет: проводит расчетно-теоретические исследования по заданной теме в области аналитической химии. Владеет: необходимыми навыками качественного проведения расчетно-теоретических исследований по заданной теме в области аналитической химии.	
	ПК-3.3. Управляет высокотехнологичным химическим оборудованием	Знает: технические характеристики высокотехнологического аналитического оборудования. Умеет: управлять высокотехнологичным аналитическим оборудованием. Владеет: навыками управления и обслуживания высокотехнологического аналитического оборудования.	Устный опрос, письменный опрос, сдача лабораторных работ
	ПК-3.4. Проводит испытания новых образцов продукции	Знает: методы проведения анализа новых образцов продукции. Умеет: проводить анализ новых образцов продукции. Владеет: навыками качественного и количественного анализа образцов новых реальных объектов.	
	ПК-3.5. Разрабатывает новые методики контроля сырья, прекурсоров и готовой продукции	Знает: методологию разработки новых методик контроля сырья, прекурсоров и готовой продукции. Умеет: проверять правильность новых методик контроля сырья,	

		<p>прекурсоров и готовой продукции.</p> <p>Владеет: навыками разработки новых методик контроля сырья, прекурсоров и готовой продукции и проверки их правильности.</p>	
<p>ПК-4. Способен обрабатывать и интерпретировать результаты проведенных работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках с использованием различных методов и подходов.</p>	<p>ПК-4.1. Обрабатывает полученные данные с использованием современных методов анализа информации.</p>	<p>Знает: современные методы анализа информации.</p> <p>Умеет: применять современные методы анализа информации для обработки полученных данных.</p> <p>Владеет: навыками обработки полученных результатов анализа реальных объектов с использованием современных методов анализа информации.</p>	<p>Устный опрос, письменный опрос, сдача лабораторных работ</p>
	<p>ПК-4.2. Грамотно интерпретирует результаты исследований в выбранной области химии.</p>	<p>Знает: методы интерпретации результатов исследований в области аналитической химии.</p> <p>Умеет: грамотно интерпретировать результаты исследований в области аналитической химии.</p> <p>Владеет: навыками интерпретации и наглядного представления результатов исследований в области аналитической химии.</p>	
	<p>ПК-4.3. Анализирует результаты испытаний сырья, прекурсоров, готовой продукции; оценивает степень их соответствия нормативным документам (стандартам и технологическим регламентам).</p>	<p>Знает: стандарты и технологические регламенты сырья, прекурсоров, готовой продукции.</p> <p>Умеет: анализировать результаты испытаний сырья, прекурсоров, готовой продукции.</p> <p>Владеет: навыками статистической обработки результатов испытаний сырья, прекурсоров, готовой продукции; оценки степени их соответ-</p>	

		ствия стандартам и технологическим регламентам.	
<p>ПК-5. Способен проводить критический анализ полученных результатов и оценивать перспективы продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках</p>	<p>ПК-5.1. Критически анализирует полученные результаты исследований в выбранной области химии, выявляет достоинства и недостатки</p>	<p>Знает: методы критического анализа полученных результатов исследований в области аналитической химии, способы выявления достоинств и недостатков.</p> <p>Умеет: критически анализировать полученные результаты анализа реальных объектов и научных исследований в области аналитической химии.</p> <p>Владеет: навыками критического анализа полученных результатов анализа реальных объектов и научных исследований в области аналитической химии.</p>	<p>Устный опрос, письменный опрос</p>
	<p>ПК-5.2. Готовит отдельные разделы отчетов по результатам НИР и НИОКР в выбранной области химии</p>	<p>Знает: методологию подготовки отчетов по результатам НИР и НИОКР в выбранной области химии.</p> <p>Умеет: готовить отдельные разделы отчетов по результатам НИР и НИОКР в области аналитической химии.</p> <p>Владеет: навыками подготовки отдельных разделов отчетов по результатам НИР и НИОКР в области аналитической химии.</p>	
	<p>ПК-5.3. Формулирует рекомендации по продолжению исследования в выбранной области химии.</p>	<p>Знает: способы подготовки рекомендаций по продолжению исследования в области аналитической химии.</p> <p>Умеет: формулировать рекомендации по продолжению исследования в области аналитической химии.</p> <p>Владеет: навыками формулировки реко-</p>	<p>Устный опрос, письменный опрос</p>

					тия	за ня ти я	ст. ра б.		
Модуль 1. Строение и симметрия молекул									
1	Геометрическое строение молекул	9		4		10		2	Устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
2	Элементы и операции симметрии молекул	9		4		14		2	Устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
<i>Итого по модулю 1</i>			36	8		24		4	
Модуль 2. ПП и НП. Точечные группы симметрии									
1	Группы преобразования симметрии. Таблицы умножения операций	9		2		8		-	Устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
2	Преобразования подобия и классы элементов группы	9		4		8		-	Устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
3	ПП и НП. Таблицы характеристик НП точечных групп.	9		4		10		-	Устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
<i>Итого по модулю 2</i>			36	10		26		-	
Итого			72	18		50		4	

4.3. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам).

Модуль 1. Строение симметрии молекул и неприводимые представления групп

Целью изучения модуля “ Теория групп симметрии молекул и ее применение в химии” является углубленное освоение студентами теории установления геометрической структуры молекул в зависимости их электронного строения и их элементов и операций симметрии

Тема 1. Геометрическое строение молекул.

Теория Гиллеспи. Структура молекул, образованных атомами 2-8 групп периодической системы элементов при возможных чисел поделенных и неподеленных электронных пар. Структура молекул при возможных числах поделенных (ПП) и неподеленных (НП) электронных пар узлового атома.

Тема 2. Элементы и операции симметрии молекул

Основными задачами модуля является закрепление теоретических знаний, лежащих в основе установления симметрии молекул,

Элементы и операции симметрии молекул, образованных атомами 2-8 групп периодической системы элементов при возможных чисел поделенных и неподеленных электронных пар.

Модуль 2. ПП и НП. Точечные группы симметрии

В этом модуле студенты научиться составлять приводимые (ПП) и неприводимые (НП) представления для молекул, получать их точечные группы симметрии составлять таблицы характеристик НП.

Тема. 1. Группы преобразования симметрии. Таблицы умножения операций.

Таблицы умножении операций симметрии. Группы преобразования симметрии.

Тема 2. Преобразования подобия и классы элементов группы. Таблицы умножении операций симметрии. Группы преобразования симметрии.

Тема 3. ПП и НП. Таблицы характеристик НП точечных групп.

Приводимые представления и неприводимые представления групп. Таблицы характеров неприводимых представлений точечных групп C_{nv} и C_{nh}

Темы практических занятий

Модуль 1. Строение и симметрия молекул.

Тема 1. Геометрическое строение молекул

Практическое занятие № 1-5. Структура молекул $Ax_n E_{n-k}$. Геометрическое строение молекул, образованных атомами с различным числом поделенных и неподеленных электронов. Строение молекул, образуемых атомов 2-8 групп.

Тема 2. Элементы и операции симметрии молекул

Практическое занятие № 6-12. Элементы симметрии и операции симметрии молекул. $Ax_n E_{n-k}$. Элементы симметрии и операции симметрии различных неорганических молекул. Симметрия молекул $Ax_n E_{n-k}$. Элементы симметрии и операции симметрии различных органических молекул. Симметрия молекул $C_n H_{n+2}$, $C_n H_n$ и других.

Модуль 2. ПП и НП. Точечные группы симметрии.

Тема 1. Группы преобразования симметрии

Практическое занятие № 13-16. Таблицы умножения операций симметрии молекул. Таблицы умножения операций молекул $Ax_n E_{n-k}$.

Тема 2. Преобразования подобия и классы элементов группы

Практическое занятие № 17-20. Преобразование подобия и установление классы элементов симметрии молекул. Проведение преобразование подобия для молекул и установление классов элементов симметрии. Классы элементов симметрии молекул $Ax_n E_{n-k}$.

Тема 3. ПП и НП. Таблицы характеров НП точечных групп

Практическое занятие № 21-24. Таблицы характеров НП. Составление таблиц характеров НП точечных групп C_{nv} и D_{nh} . Приводимые неприводимые представления ПП и НП групп симметрии молекул $Ax_n E_{n-k}$.

5. Образовательные технологии

В курсе по направлению подготовки студентов широко используются в учебном процессе компьютерные программы, различные методики в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития профессиональных навыков обучающихся. В соответствии с требованиями ФГОС предусматривается использование при проведении занятий следующих активных методов обучения:

- самостоятельное изучение теоретического материала с последующим разбором на семинарском занятии;
- классические лекции с программируемым опросом, с использованием интерактивных средств - не менее 25%;
- обеспечение студентов конспектами лекций;
- самостоятельное изучение теоретического материала с последующим разбором на семинарском занятии;
- семинарские занятия с анализом узловых теоретических положений, выделенных в лекциях;
- контрольные работы по каждой теме семинарских занятий;
- решение задач с использованием интерактивных и вычислительных средств, в том числе компьютерного моделирования структур сложных молекул приближенными методами квантовой химии – не менее 10%;
- выполнение студентами индивидуальных многоэтапных и многовариантных задач, организация самостоятельного обучения;
- выполнение рефератов и докладов с их защитой;
- выполнение моделей молекул по методу стержень-шарик.

- итоговой контроль осуществляется посредством рейтинговой оценки.

6. Учебно - методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Виды и порядок выполнения самостоятельной работы

1. Изучение рекомендованной литературы.
2. Решение задач.
3. Подготовка к коллоквиуму.
4. Поиск в Интернете дополнительного материала.
6. Подготовка к зачету.

№	Вид самостоятельной работы	Вид контроля	Учебно-методич. обеспечение
1.	Изучение рекомендованной литературы.	Устный опрос по разделам дисциплины.	См. разделы 7.2, 8, 9 данного документа.
2.	Подготовка к отчетам по индивидуальным заданиям	Проверка выполнения расчетов, оформления индивидуальной работы и проработки вопросов по рекомендованной литературе.	См. разделы 7.1, 8, 9 данного документа.
3.	Решение задач	Проверка домашних задач.	См. разделы 7.1, 8, 9 данного документа.
4.	Подготовка к коллоквиуму	Промежуточная аттестация в форме контрольной работы.	См. разделы 7.1, 8, 9 данного документа.
5.	Поиск в Интернете дополнительного материала	Прием реферата и выступление с докладом	См. разделы 6.2, 7.1, 8, 9 данного документа.
6.	Подготовка к зачету	Устный опрос, либо компьютерное тестирование.	См. разделы 7.1, 8, 9 данного документа.

Текущий контроль успеваемости осуществляется непрерывно, на протяжении всего курса. Прежде всего, это устный опрос по ходу лабораторных занятий, выполняемый для оперативной активизации внимания студентов и оценки их уровня восприятия. Результаты устного опроса учитываются при выборе индивидуальных задач для решения. Каждую неделю осуществляется проверка выполнения расчетов, оформления работы в лабораторном журнале.

Промежуточный контроль проводится в форме контрольной работы, в которой содержатся теоретические вопросы и задачи.

Итоговый контроль проводится либо в виде устного зачета, либо в форме тестирования.

Оценка “отлично” ставится за уверенное владение материалом курса.

Оценка “хорошо” ставится при полном выполнении требований к прохождению курса и умении ориентироваться в изученном материале.

Оценка “удовлетворительно” ставится при достаточном выполнении требований к прохождению курса и владении конкретными знаниями по программе курса.

Оценка “неудовлетворительно” ставится, если требования к прохождению курса не выполнены и студент не может показать владение материалом.

7. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

7.1. Контрольные вопросы по темам

Модуль 1. Строение и симметрия молекул

1. Теория отталкивания электронных оболочек. Геометрическое строение молекул при различных валентных состояниях узлового атома и числах поделенных и неподеленных электронных пар вокруг него.
2. Линейное преобразование координат. Матрица преобразование координат.
2. Ось симметрии и операция вращения. Матрица оператора вращения.
3. Плотность симметрии и операция отражения. Матрица оператора отражения.
4. Зеркально-поворотная ось и несобственное вращение.
5. Центр симметрии и операция инверсии. Матрица оператора инверсии.
6. Группы преобразования симметрии.
7. Точечные группы симметрии. Конечные и непрерывные точечные группы.
8. Таблица умножения операций симметрии точечной группы C_{2v} .
9. Таблица умножения операций симметрии точечной группы C_{3v} .
10. Преобразования подобия и классы элементов точечной группы C_{2v} .
11. Преобразования подобия и классы элементов точечной группы C_{3v} .

Модуль 2. ПП и НП. Точечные группы симметрии

1. Представления групп. Представление группы C_{2v} для антисимметричной
2. Представление группы C_{2v} для метилениклопропена в базисе координат атома углерода.
3. Представление группы C_{3v} в базисе координат x, y, z .
4. Неприводимые представления (НП). Таблица характеров НП группы C_{2v} .
5. Неприводимые представления (НП). Таблица характеров НП группы C_{3v} .
6. Разложить представления группы C_{2v} $3(E), -1(C_2), 1(\sigma_v), 1(\sigma'_v)$ на НП.
7. Атомные орбитали как базисы представлений.
8. Использование проекционных операторов для построения МО молекул точечной группы C_{2v} .
9. Использование проекционных операторов для построения МО молекул точечной группы C_{3v} .
10. Правило векторного сложения Клебша-Гордана.

Тематика рефератов

1. Классическая теория химического строения. Структурная и пространственная изомерия. Энантиомерия, диастереомерия. Изомерия вращения.
2. Геометрическая конфигурация молекул. Теория отталкивания электронных пар валентных оболочек.
3. Элементы симметрии и операции симметрии. Точечные группы симметрии.
4. Таблицы умножения операций симметрии
5. Преобразования подобия и классы сопряженных элементов различных групп симметрии.
6. Приводимые представления, базисы представления различных молекул в базисах смещений атомов, координат атомов, атомных орбиталей.
7. Приводящая матрица.
8. Неприводимые представления. Таблицы характеров НП точечных конечных групп симметрии.
9. Непрерывные группы.
10. Произведения характеров групп трехмерных вращений и правило Клебша-Гордана.
11. Разложение ПП в различных базисах на НП.

12. Построение молекулярных орбиталей симметрии с помощью проекционного оператора.
11. Дипольный момент перехода и его матрицы.

Контрольные вопросы к зачету

1. Линейное преобразование координат. Матрица преобразования координат.
2. Ось симметрии и операция вращения. Матрица оператора вращения.
3. Плотность симметрии и операция отражения. Матрица оператора отражения.
4. Зеркально-поворотная ось и несобственное вращение.
5. Центр симметрии и операция инверсии. Матрица оператора инверсии.
6. Группы преобразования симметрии.
7. Точечные группы симметрии. Конечные и непрерывные точечные группы.
8. Таблица умножения операций симметрии точечной группы C_{2v} .
9. Таблица умножения операций симметрии точечной группы C_{3v} .
10. Преобразования подобия и классы элементов точечной группы C_{2v} .
11. Преобразования подобия и классы элементов точечной группы C_{3v} .
12. Представления групп. Представление группы C_{2v} для антисимметричной МО ψ_3 метиленициклопропена.
13. Представление группы C_{2v} для метиленициклопропена в базисе координат атома углерода.
14. Представление группы C_{2v} в базисе координат x, y, z .
15. Представление группы C_{3v} в базисе координат x, y, z .
16. Неприводимые представления (НП). Таблица характеров НП группы C_{2v} .
17. Неприводимые представления (НП). Таблица характеров НП группы C_{3v} .
18. Обозначения характеров неприводимых представлений.
19. Разложить представления группы C_{2v} $3(E), -1(C_2), 1(\sigma_v), 1(\sigma'_v)$ на НП.
20. Разложить ПП группы C_{3v} $3(E), 0(C_3), 1(\sigma_v)$ на НП.
21. Разложить ПП группы C_{2v} $4(E), 0(C_2), 4(\sigma_v), 0(\sigma'_v)$ на НП.
22. Разложить ПП группы C_{2v} $12(E), -2(C_2), 4(\sigma_v), 2(\sigma'_v)$ на НП.
23. Атомные орбитали как базисы представлений.
24. Использование проекционных операторов для построения МО молекул точечной группы C_{2v} .
25. Использование проекционных операторов для построения МО молекул точечной группы C_{3v} .
26. Правило векторного сложения Клебша-Гордана.

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.

а) Основная литература:

1. Шабанов О.М., Рабаданов М.Х. Строение вещества. ИПЦ ДГУ, Махачкала, 2011.
2. Шабанов О.М. Теория точечных групп симметрии. ИПЦ ДГУ, Махачкала, 2004.
3. Смирнов, В. П. Групповые методы в теории атомов, молекул и кристаллов: учебное пособие / В. П. Смирнов. — Санкт-Петербург : Университет ИТМО, 2013. -103 с. - ISBN 2227-8397. - Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. - URL: <http://www.iprbookshop.ru/66434.html> (дата обращения: 10.02.2020).

б) Дополнительная литература:

1. Пентин Ю.А., Курамшина Г.М. Основы молекулярной спектроскопии. М.: Мир, 2008.
2. Шабанов О.М. Математические начала квантовой химии. Махачкала: Эпоха. 2003.
3. Шабанов О.М. Атомные и молекулярные термы. ИПЦ ДГУ, Махачкала, 2002.

4. Шабанов О.М. Правила отбора в молекулярной спектроскопии. ИПЦ ДГУ, Махачкала, 2002.

5. Венер, М. В. Строение молекул и основы квантовой химии : учебное пособие / М. В. Венер. — Москва : Московский городской педагогический университет, 2010. - 90 с. - ISBN 2227-8397. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. — URL: <http://www.iprbookshop.ru/26626.html> (дата обращения: 10.02.2020).

9. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

1. eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]: электронная библиотека / Науч. электрон. б-ка. – Москва, 1999. – Режим доступа: <http://elibrary.ru/defaultx.asp> (дата обращения: 21.10.2019). – Яз. рус., англ.
2. Электронный каталог НБ ДГУ [Электронный ресурс]: база данных содержит сведения о всех видах лит, поступающих в фонд НБ ДГУ/Дагестанский гос. ун-т. – Махачкала, 2010 – Режим доступа: <http://elib.dgu.ru>, свободный (дата обращения: 21.10.2019)
3. ЭБС iprbook.ru [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/31168.html> (дата обращения: 21.10.2019).

10. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Методические указания студентам должны раскрывать рекомендуемый режим и характер учебной работы по изучению теоретического курса (или его раздела/части), практических и/или семинарских занятий, лабораторных работ (практикумов), и практическому применению изученного материала, по выполнению заданий для самостоятельной работы, по использованию информационных технологий и т.д. Методические указания должны мотивировать студента к самостоятельной работе и не подменять учебную литературу.

Указывается перечень учебно-методических изданий, рекомендуемых студентам для подготовки к занятиям и выполнения самостоятельной работы, а также методические материалы на бумажных и/или электронных носителях, выпущенные кафедрой своими силами и предоставляемые студентам во время занятий:

- рабочие тетради студентов;
- наглядные пособия;
- гlossарий (словарь терминов по тематике дисциплины);
- тезисы лекций,
- раздаточный материал и др.

Самостоятельная работа студентов, предусмотренная учебным планом в объеме не менее 50-70% общего количества часов, должна соответствовать более глубокому усвоению изучаемого курса, формировать навыки исследовательской работы и ориентировать студентов на умение применять теоретические знания на практике.

Задания для самостоятельной работы составляются по разделам и темам, по которым не предусмотрены аудиторские занятия, либо требуется дополнительно проработать и проанализировать рассматриваемый преподавателем материал в объеме запланированных часов.

Задания по самостоятельной работе могут быть оформлены в виде таблицы с указанием конкретного вида самостоятельной работы:

- конспектирование первоисточников и другой учебной литературы;
- проработка учебного материала (по конспектам лекций учебной и научной литературе) и подготовка докладов на семинарах и практических занятиях, к участию в тематических дискуссиях и деловых играх;
- работа с нормативными документами и законодательной базой;
- поиск и обзор научных публикаций и электронных источников информации, подготовка заключения по обзору;

- литературный поиск используя онлайн поисковую систему NIST/TRC;
- выполнение контрольных работ, творческих (проектных) заданий, курсовых работ (проектов);
- решение задач, упражнений;
- написание рефератов (эссе);
- работа с тестами и вопросами для самопроверки;
- выполнение переводов на иностранные языки/с иностранных языков;
- моделирование и/или анализ конкретных проблемных ситуаций ситуации;
- обработка статистических данных, нормативных материалов;
- анализ статистических и фактических материалов, составление выводов на основе проведенного анализа и т.д.

Самостоятельная работа должна носить систематический характер, быть интересной и привлекательной для студента.

Результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем и учитываются при аттестации студента (зачет, экзамен). При этом проводятся: тестирование, экспресс-опрос на семинарских и практических занятиях, заслушивание докладов, проверка письменных работ и т.д.

11. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем.

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине “Фазовое равновесие в сложных многокомпонентных системах для химических технологий” используются следующие информационные технологии:

- Занятия компьютерного тестирования.
- Демонстрационный материал применением проектора.
- Компьютерные программы для статистической обработки результатов анализа.
- Программы пакета Microsoft Office

12. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

В соответствии с требованиями ФГОС ВО кафедра имеет специально оборудованную учебную аудиторию для проведения лекционных занятий, которая укомплектована техническими средствами обучения (экран настенный с электроприводом и дистанционным управлением, мультимедиа проектор с ноутбуком).