

1. THÔNG TIN VỀ HỌC PHẦN VÀ GIẢNG VIÊN

- 1.1. Tên học phần: Ứng dụng lý thuyết nhóm trong hóa học. Mã số: TNH616
- 1.2. Trình độ: Thạc sĩ
- 1.3. Cấu trúc học phần: Số TC: 03 (LT: 02; BT: 01)
- 1.4. Học phần tiên quyết:.....Mã số:.....
- 1.5. Bộ môn phụ trách giảng dạy: Hóa học; Khoa/Viện: KHTN
- 1.6. Thông tin giảng viên:

Họ và tên Giảng viên: Phạm Vũ Nhật

Học hàm, học vị: Tiến sĩ

Địa chỉ liên hệ: ĐT: 0939634524. Email: nhat@ctu.edu.vn.

2. MÔ TẢ HỌC PHẦN

Học phần được thiết kế nhằm cung cấp cho học viên những kiến thức cơ bản về đối xứng phân tử và lý thuyết nhóm cũng như những áp dụng của chúng để giải quyết các vấn đề hóa học. Sau khi kết thúc khóa học này, học viên sẽ có những hiểu biết đúng đắn và đầy đủ về liên kết hóa học, quang phổ điện tử và phổ dao động. Kiến thức môn học cũng là nền tảng để học viên có thể tự học, tự nghiên cứu những vấn đề như mô phỏng phân tử, phổ IR, UV-VIS, hóa vô cơ và hóa lý hiện đại.

3. MỤC TIÊU HỌC PHẦN

3.1. Giới thiệu tổng quát về học phần

Học phần này thuộc khối kiến thức cơ sở ngành; sẽ giới thiệu cho học viên các vấn đề sau:

- Đối xứng phân tử và các nhóm điểm
- Cơ sở toán học của biểu diễn nhóm
- Đối xứng và dao động phân tử
- Đối xứng và liên kết hóa học

3.2. Nội dung chi tiết học phần

Chương	Tiết (LT/BT/TH)
Chương 1. Đối xứng phân tử 1.1. Yếu tố đối xứng và phép đối xứng 1.2. Tính chất của các phép đối xứng 1.3. Đối xứng và các tính chất vật lý 1.4. Nhóm điểm đối xứng và cách xác định nhóm điểm các phân tử 1.5. Bài tập <i>Để học tốt chương này học viên tham khảo các tài liệu:[2], [3]</i>	5/5/0

Chương	Tiết (LT/BT/TH)
<p>Chương 2. Cơ sở toán học của biểu diễn nhóm</p> <p>2.1. Sơ lược về nhóm, nhóm con và lớp</p> <p>2.2. Ma trận và biểu diễn đối xứng bằng ma trận</p> <p>2.3. Bảng character (Character tables) và tính chất của các biểu diễn bất khả qui</p> <p>2.4. Biểu diễn khả qui và rút gọn một biểu diễn khả qui</p> <p>2.5. Các biểu diễn suy biến</p> <p>2.6. Mọi liên hệ giữa các nhóm điểm</p> <p>2.7. Bảng tương quan (correlation tables)</p> <p>2.8. Tích trực tiếp của các biểu diễn bất khả qui</p> <p>2.9. Bài tập</p> <p><i>Để học tốt chương này học viên tham khảo các tài liệu [1], [4]</i></p>	5/5/0
<p>Chương 3. Đối xứng và dao động phân tử</p> <p>3.1. Các qui tắc chọn lọc của phổ dao động</p> <p>3.2. Phương pháp tọa độ Đề-cac-tơ</p> <p>3.3. Phương pháp tọa độ riêng</p> <p>3.4. Phổ dao động của một số phân tử điển hình</p> <p>3.5. Phương pháp toán tử chiếu (Projection Operator Method) và các kiểu dao động chuẩn tắc</p> <p>3.6. Bài tập</p> <p><i>Để học tốt chương này học viên tham khảo các tài liệu [1], [5]</i></p>	5/5/0
<p>Chương 4. Đối xứng và liên kết hóa học</p> <p>4.1. Các orbital lai hóa cho liên kết σ</p> <p>4.2. Các orbital lai hóa cho liên kết π</p> <p>4.3. Giải đồ MO và cấu trúc electron của các phân tử không thẳng hàng</p> <p>4.4. Phương pháp toán tử chiếu và các SALCs (Symmetry Adapted Linear Combinations)</p> <p>4.5. Các orbital suy biến và phương pháp trực chuẩn Schmidt</p> <p>4.6. Bài tập</p> <p><i>Để học tốt chương này học viên tham khảo các tài liệu [1], [5]</i></p>	5/10/0

4. PHƯƠNG PHÁP GIẢNG DẠY VÀ ĐÁNH GIÁ

4.1. Phương pháp giảng dạy:

- Thuyết trình.
- Dựa trên vấn đề (Problem Based Learning & Case Study)
- Thảo luận nhóm (Think – Pair – Share & Group Based Learning) – bài tập/ thực hành.

4.2. Phương pháp đánh giá:

Sinh viên được đánh giá tích lũy học phần dựa theo các tiêu chí như sau:

TT	Điểm thành phần	Quy định	Trọng số
1	Điểm chuyên cần	Tham dự đủ 100% tiết lý thuyết; Hoàn thành tất cả các bài tập được giao	10%
2	Điểm kiểm tra giữa kỳ	- Thi viết: Tự luận + trắc nghiệm (60 phút)	20%
3	Điểm thi kết thúc học phần	- Thi viết: Tự luận + trắc nghiệm (90 phút) - Bắt buộc dự thi	70%

5. TÀI LIỆU THAM KHẢO CỦA HỌC PHẦN

- [1] F. Albert Cotton, *Chemical Applications of Group Theory*, 3rd Ed., John Wiley & Sons, New York, 1990.
- [2] A. Vincent, *Molecular Symmetry and Group Theory*, 3rd Ed., John Wiley & Sons, 2009.
- [3] D. J. Willock, *Molecular Symmetry*, John Wiley & Sons, 2009.
- [4]. P. W. M. Jacobs, *Group Theory With Applications in Chemical Physics*, Cambridge University Press, 2005.
- [5] I. Hargittai and M. Hargittai, *Symmetry through the Eyes of a Chemist*, 2nd Ed., Plenum Press, 1995.

Duyệt của đơn vị
TL. HIỆU TRƯỞNG
TRƯỞNG KHOA/VIỆN

Ngày tháng năm 2017
Người biên soạn

Phạm Vũ Nhật