

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

И.о. декана химического факультета,
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«30» августа 2019 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
Современная неорганическая химия

Уровень высшего образования:
Магистратура

Направление подготовки (специальность):
04.04.01 Химия

Направленность (профиль) ОПОП:
Неорганическая химия

Форма обучения:
очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №3 от 13.05.2019)

Москва 2019

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки 04.04.01 «Химия» (программа магистратуры) в редакции приказа МГУ от 30 августа 2019 г., №1033.

Год (годы) приема на обучение 2019/2020, 2020/2021

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – индикатор - ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.

| Компетенция | Индикатор достижения | Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю) |
|--|--|--|
| СПК-1.М Способен применять теоретические основы неорганической химии и Периодический закон для объяснения химических свойств неорганических соединений, изменения свойств в рядах веществ и прогнозирования свойств новых неорганических веществ, владение основными представлениями о взаимосвязи состава, кристаллического и электронного строения, химических и физических свойств неорганических веществ и материалов для решения задач профессиональной деятельности | СПК-1.М.1 Применяет теоретические основы неорганической химии при дизайне и планировании синтетических операций для получения новых неорганических соединений с заданными свойствами | Знать: современное состояние неорганической химии, ее роль в современном естествознании и материаловедении; Знать: основные способы описания химической связи в молекулах, комплексных соединениях и твердом теле; Знать: подходы к дизайну и синтезу новых неорганических соединений с заданными свойствами; Знать: фундаментальные принципы взаимосвязи между составом, строением, свойствами и реакционной способностью неорганических соединений. |
| | СПК-1.М.2 Интерпретирует результаты исследований в области неорганической химии на основе современных представлений о химической связи, периодичности свойств и реакционной способности неорганических соединений | Уметь: интерпретировать результаты в области неорганической химии на основе современных представлений о химической связи, периодичности свойств и реакционной способности неорганических соединений; Владеть: подходами современной неорганической химии для анализа химической связи, строения и реакционной способности неорганических соединений |
| | СПМ-1.М.3 Прогнозирует строение и свойств различных классов неорганических соединений на основе знания фундаментальных основ неорганической химии | Уметь: использовать полученные знания для предсказания строения и свойств различных классов неорганических соединений. |

| | | |
|--|---|---|
| СПК-3.М Способен формулировать квантовохимические расчетные задачи для моделирования различных неорганических систем и выбирать параметры моделирования; владение навыками интерпретации получаемой квантовохимической информации | СПК-3.М.1 Грамотно оценивает качество квантово-химического моделирования неорганических систем | Знать: общие представления о возможностях квантовой химии при решении задач неорганического материаловедения Знать: основные критерии оценки адекватности квантово-химических расчетов |
|--|---|---|

3. Объем дисциплины (модуля) составляет **4** зачетных единицы, всего **144** часа, из которых **84** часа составляет контактная работа студента с преподавателем (57 часов занятия лекционного типа, 19 часов – занятия семинарского типа, 4 часа – групповые консультации, 4 часа – промежуточный контроль успеваемости), **60** часов составляет самостоятельная работа студента.

4. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Знать: основные закономерности в изменении свойств неорганических соединений, характерные реакции, в которые вступают соединения различных элементов. Основы кристаллохимии и строения молекул.

Уметь: описывать строение молекул и кристаллические структуры.

Владеть: терминологией и представлениями о химической связи, строении частиц.

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

| Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттеста- | Всего (часы) | В том числе | |
|---|--------------|---|---|
| | | Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них | Самостоятельная работа обучающегося, часы из них |
| | | | |

| | | Занятия лекционного типа | Занятия семинарского типа | Групповые консультации | Индивидуальные консультации | Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации | Всего | Выполнение домашних заданий | Подготовка рефератов и т.п.. | Всего |
|---|------------|--------------------------|---------------------------|------------------------|-----------------------------|--|--------------|-----------------------------|------------------------------|--------------|
| Тема 1. Симметрия и химическая связь в многоатомных молекулах | 22 | 12 | 4 | | | | 16 | 6 | | 6 |
| Тема 2. Комплексные соединения | 24 | 12 | 4 | 2 | | | 18 | 6 | | 6 |
| Тема 3. Реакционная способность комплексных соединений | 14 | 7 | 3 | | | | 10 | 4 | | 4 |
| Тема 4. Основы химии кластеров | 22 | 12 | 4 | | | | 16 | 6 | | 6 |
| Тема 5. Основы химии твердого тела | 26 | 14 | 4 | 2 | | | 20 | 6 | | 6 |
| Промежуточная аттестация <u>экзамен</u> | 36 | | | | | 4 | 4 | | | 32 |
| Итого | 144 | 57 | 19 | 4 | | 4 | 84 | 28 | | 60 |

6. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

7. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Курс имеет электронную версию для презентации в формате PDF. Лекции читаются с использованием современных мультимедийных возможностей и проекционного оборудования.

Задания для самостоятельной работы

Раздел 1. Название раздела Симметрия и химическая связь в многоатомных молекулах

Тема 1.1 Название темы Основные определения и основы метода МО-ЛКАО

1. Перечислите закрытые элементы симметрии
2. Укажите основные приближения метода МО-ЛКАО
3. Дайте определение понятию «групповые орбитали»
4. Рассмотрите понятия «представление», «непреводимое представление», «характер», «операция симметрии», «точечная группа симметрии»
5. Определите элементы симметрии и точечную группу молекул CH_4 , PF_5 , NO_2 , XeF_4 , BF_3 , SnFCl
6. Постройте энергетическую диаграмму молекулы аммиака, используя подход групповых орбиталей

Тема 1.2 Название темы Некоторые принципы и следствия метода МО-ЛКАО

1. Дайте определение понятию «гибридизация».
2. Приведите примеры электрондефицитных и гипервалентных молекул, подтвердите расчетом Ваш выбор.
3. Приведите примеры изообальных ионов и молекул.
4. Предложите объяснение причины диагонального сходства на примере пары элементов Be-Al
5. Обсудите изменение первого потенциала ионизации в 3м периоде.
6. Дайте определение понятию «катенация». Обсудите изменение склонности к катенации у элементов 15й группы ПС.

Тема 1.3 Название темы Межмолекулярные и нековалентные взаимодействия

1. Перечислите известные Вам типы межмолекулярного взаимодействия и расставьте их в порядке убывания энергии
2. Сравните особенности, энергию и направленность ион-ионного и ион-дипольного взаимодействия
3. Обсудите, от каких факторов зависит константа Маделунга.
4. Обсудите факторы, определяющие термодинамическую устойчивость ионных соединений.
5. Перечислите и обсудите основные особенности формирования водородной связи и ее влияния на физические свойства соединений.

Тема 2.1 Название темы Образование мономерных комплексов

1. Перечислите положение теории Льюиса.

2. Отнесите следующие катионы к мягким или жестким по Пирсону, мотивируйте свой выбор: Fe^{3+} , Bi^{3+} , La^{3+} , Ga^{3+} , Na^{1+} , Ru^{2+} , Cu^{2+}
3. Обсудите смысл параметров С и Е, входящих в уравнение Драго-Вейланда
4. Среди факторов, определяющих устойчивость комплексов, выделите термодинамические и кинетические.
5. Что такое хелатный эффект? Приведите примеры соединений, в которых он проявляется.
6. Перечислите основные факторы, определяющие устойчивость комплексов щелочных металлов.

Тема 2.2 Название темы Электронное строение и свойства моноядерных комплексов d-металлов

1. Назовите основные положения теории кристаллического поля.
2. Постройте энергетическую диаграмму расщепления орбиталей иона Ru^{2+} в октаэдрическом поле лигандов.
3. Дайте относительное расположение в спектрохимическом ряду следующих лигандов: SCN^{1-} , Cl^{1-} , py , CN^{1-} , NH_3
4. Рассмотрите квантовые числа атома или иона.
5. Дайте определение понятию «терм» и обсудите способ вывода терма основного состояния
6. Обсудите особенности расщепления терма основного состояния в октаэдрическом поле.
7. Укажите основные особенности и области применения диаграмм Оргела и Танабэ-Сугано
8. Рассмотрите влияние π -связывания на диаграмму МО октаэдрических комплексов переходных металлов. Сравните влияние донорных и акцепторных лигандов.
9. Рассмотрите кратность связи металл-лиганд в алкилиденных и карбеновых комплексах переходных металлов. Сравните энергетические особенности карбенов Фишера и Шрока.
10. Что такое правило Сиджвика?
11. Обсудите особенности образования и электронного строения карбониллов переходных металлов

Тема 2.3 Название темы Особенности комплексов f-металлов

1. Обсудите особенности 4f орбиталей – их энергию, радиальное распределения – и их влияние на свойства соединений лантанидов.
2. Рассмотрите влияние сильного спин-орбитального взаимодействия на свойства производных f-металлов
3. Выведите термы основного состояния для ионов Pr^{4+} , Sm^{3+} , Eu^{2+} , Dy^{3+} , Tm^{2+} , Yb^{3+}
4. Обсудите сходство и различие химических свойств соединений лантанидов и актининов.
5. Обсудите причины и проявления сходства химии ранних 5f-металлов и переходных металлов 5го и 6го периодов

Тема 3.1. Реакционная способность комплексных соединений

1. Рассмотрите основные отличия ассоциативного, диссоциативного и обменного механизмов реакций
2. Обсудите методы исследования механизмов реакций комплексных соединений
3. Обсудите основные причины и проявления взаимного влияния лигандов на примере квадратных комплексов палладия и платины
4. Что такое барьер по Маркусу-Хашу? Как он определяет протекание окислительно-восстановительных реакций комплексных соединений

5. Обсудите энергетические и размерные факторы, определяющие протекание окислительно-восстановительных реакций комплексных соединений
6. Сравните внешнесферные и внутрисферные реакции
7. Рассмотрите основные особенности реакции окислительного присоединения.
8. Обсудите каталитические реакции с использованием понятия «петля Толмена»

Тема 4.1. Полядерные системы и взаимодействие металл-металл

1. Сравните непосредственное и косвенное взаимодействие между атомами металла в биядерном комплексном соединении
2. Обсудите понятие «сверхобмен» и его проявление
3. Сравните понятия «эффект Яна-Теллера 1го рода» и «кооперативный эффект Яна-Теллера»
4. Рассмотрите образование кратной связи между атомами металла.
5. Рассмотрите особенности δ -компоненты химической связи и ее влияние на кратность связи металл-металл

Тема 4.2. Островные и конденсированные кластеры

1. Обсудите применение правила Сиджвика к кластерным соединениям.
2. Сравните строение и электронные свойства различных кластеров переходных металлов с октаэдрическим металлоостовом.
3. Дайте определение понятиям «число кластерных валентных электронов» и «число кластерных скелетных электронов»
4. Обсудите основные различия кластеров d-металлов с донорными и акцепторными лигандами
5. Приведите основные различия кластеров переходных и непереходных металлов
6. Дайте определение понятию «фаза Цинтля»
7. Обсудите, являются ли следующие соединения фазами Цинтля: KSnSb , NaBF_4 , LiP , MgAs_2

Тема 4.3. Введение в супрамолекулярную химию

1. Обсудите понятия «гость, хозяин, субстрат, рецептор»
2. Сравните особенности хелатного и макроциклического эффектов
3. Обсудите понятие «комплементарность», его составляющие и проявление в супрамолекулярной химии
4. Рассмотрите классификацию неорганических супрамолекулярных ансамблей по Ройтеру-Мюллеру.
5. Приведите примеры 3D супрамолекулярных ансамблей
6. Рассмотрите особенность металл-органических координационных полимеров и гибридных соединений

Тема 5.1. Введение в электронное строение твердого тела

1. Обсудите понятия трансляционного базиса, решетки Брвэ, решетки Брвэ с базисом.
2. Рассмотрите выбор примитивных элементарных ячеек для кубических центрированных решеток.
3. Что является трансляционным базисом обратной ячейки в k-пространстве?

4. Опишите алгоритм построения 1 зоны Бриллюэна.

5. Что такое поверхность Ферми? Приведите примеры расчета радиуса поверхности Ферми для простых металлов.

Тема 5.2. Твердые тела с трехмерной структурой

1. Обсудите закономерности изменения магнитных и электрических свойств в ряду монооксидов 3d-переходных.

2. Каким типом проводимости обладали бы NbS_2 и MoS_2 при условии октаэдрической координации атомов металла в данных соединениях? (Сравните с тригонально-призматической координацией).

3. Поляризация титаната бария при некоторой температуре составляет 0.25 К/м^2 . Считая решетку примитивной кубической с параметром 4 \AA оценить величину дипольного момента, приходящегося на одну ячейку. Могут ли проявлять сегнетоэлектрические свойства соединения с центросимметричной кристаллической структурой? Почему?

4. Сравните электрические и магнитные свойства соединений CaFeO_3 , SrFeO_3 и CaMnO_3 ? Объясните причины различий

Тема 5.3. Низкоразмерные твердые тела.

1. Определите тип взаимодействия d_{xz} и d_{yz} орбиталей для линейной цепочки одинаковых атомов вдоль оси z с межатомным расстоянием a для значений $k=0$ и π/a . Обозначьте тип МО, образующихся в каждом случае. Изобразите схематично дисперсионные кривые $E(k)$ для линии $\Gamma(k=0)$ - $Z(k=\pi/a)$.

2. Рассчитайте константу Маделунга для линейной цепочки ионов (± 1) с межатомным расстоянием a .

3. Хлорид никеля относится к структурному типу CdCl_2 (3R). Дайте обоснованный ответ: какие типы магнитных взаимодействий может реализовываться в этой структуре? Какое из них будет доминирующим?

8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Со всех компьютеров МГУ организован доступ к полным текстам научных журналов и книг на русском и иностранных языках. Доступ открыт по IP-адресам, логин и пароль не требуются: <http://nbmgu.ru/>

Основная литература

1. Дж. Хьюи. Неорганическая химия. Ленинград.Химия. 1986
2. А. Драго. Физические методы в химии. Москва. Мир .1981
3. Д. Шрайвер, П. Эткинс. Неорганическая химия. Москва. Мир. 2004
4. И.Б. Берсукер. Электронное строение и свойства координационных соединений. Ленинград. Химия. 1986
5. Ф. Басоло, Р. Пирсон Механизмы неорганических реакций. Москва. Мир. 1971
6. С.П. Губин. Химия кластеров. Москва. Наука. 1987
7. Ф.А. Коттон, Р. Уолтон. Кратные связи металл-металл. Москва. Мир. 1985
8. Дж.Б. Гуденаф. Магнетизм и химическая связь. Москва. Металлургия. 1968

9. Л.М. Ковба. Окислы переходных металлов. Москва. Изд-во МГУ. 1973

Дополнительная литература

1. В.В. Скопенко, А.Ю. Цивадзе, Л.И. Савранский, А.Д. Гарновский. Координационная химия. Москва. Академкнига. 2007
2. Ч.Н.Р. Рао, Дж. Гопалакришнан. Новые направления в химии твердого тела. Новосибирск. Наука. 1990
3. Р. Хоффман. Строение твердых тел и поверхностей: взгляд химика-теоретика. Москва. Мир. 1990
4. S.F.A. Kettle. Symmetry and Structure. Readable Group Theory for Chemists. 2nd ed.. Chichester. John Wiley & Sons. 1998
5. F.A. Cotton. Chemical Applications of Group Theory. New York. John Wiley & Sons. 1990
6. C. Housecroft, A.G. Sharpe. Inorganic Chemistry. Harlow. Prentice Hall. 2001
7. Н.А. Костромина, В.Н. Кумок, Н.А. Скорик. Химия координационных соединений. Москва. Высшая школа. 1990

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели: д.х.н., проф. Шевельков А.В., к.х.н., доц. Истомин С.Я., к.х.н., доц. Розова М.Г., к.х.н., с.н.с. Верчерко В.Ю.

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - экзамена. На экзамене проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

Вопросы к экзамену

1. Нарисуйте схему расщепления d-орбиталей металла в комплексе $[\text{Cr}(\text{NH}_3)_4\text{F}_2]^{1+}$, имеющем транс-строение, определите его точечную группу и припишите представления всем d-орбиталям. Определите чисто спиновый магнитный момент комплекса. Проанализируйте, как может измениться магнитный момент при замене Cr^{III} на Co^{III} в комплексе.
2. Выведите терм основного состояния иона Fe^{3+} . Определите, сколько d-d переходов и между какими термами ожидается в UV-viz спектре комплекса $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$. Ответ мотивируйте.
3. Определите кратность связи Rh-Rh в соединении $[\text{Rh}_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]\text{ClO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и укажите заселенность орбиталей, отвечающих за связь между атомами металла, электронами. Оцените ожидаемый магнитный момент в расчете на пару Rh-Rh.
4. Из приведенного списка лигандов выберите тот, который легче всего вступит в реакцию $\text{Mo}(\text{CO})_6 \rightarrow \text{Mo}(\text{CO})_5\text{L} + \text{CO}$ под действием ультрафиолетового излучения и тот, который не вступит в реакцию: PMe_3 , $\text{P}(\text{O}^i\text{Ph})_3$, PF_3 , PCl_3 , PPh_3 . Ответ мотивируйте.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

| ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю) | | | | |
|---|--------------------|--|---|--|
| Оценка \ Результат | 2 | 3 | 4 | 5 |
| Знания | Отсутствие знаний | Фрагментарные знания | Общие, но не структурированные знания | Сформированные систематические знания |
| Умения | Отсутствие умений | В целом успешное, но не систематическое умение | В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера) | Успешное и систематическое умение |
| Навыки (владения) | Отсутствие навыков | Наличие отдельных навыков | В целом, сформированные навыки, но не в активной форме | Сформированные навыки, применяемые при решении задач |

| РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю) | ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ |
|--|--|
| Знать: современное состояние неорганической химии, ее роль в современном естествознании и материаловедении; основные способы описания химической связи в молекулах, комплексных соединениях и твердом теле; подходы к дизайну и синтезу новых неорганических соединений с заданными свойствами; фундаментальные принципы взаимосвязи между составом, строением, свойствами и реакционной способностью неорганических соединений. | мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене |
| Уметь анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы, Уметь: самостоятельно составлять план исследования Уметь: интерпретировать результаты в области неорганической химии на основе современных представлений о химической связи, периодичности свойств и реакционной способности неорганических соединений; использовать полученные знания для предсказания строения и свойств различных классов неорганических соединений. | мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене |
| Владеть навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения Владеть: подходами современной неорганической химии для анализа химической связи, строения и реакционной способности неорганических соединений. | мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене |

