

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное образовательное учреждение высшего
профессионального образования "Московский государственный университет
имени М.В.Ломоносова"
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

« ___ » _____ 20__ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
«Теоретическая неорганическая химия»
НАПРАВЛЕНИЕ ПОДГОТОВКИ 020201 «ХИМИЯ»

Специальность
«Фундаментальная и прикладная химия»

Квалификация (степень) выпускника
специалист

Форма обучения очная

Москва
2013

Программа дисциплины «**Теоретическая неорганическая химия**» составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО к структуре и результатам освоения основных образовательных программ специалитета по профессиональному циклу по направлению подготовки «Фундаментальная и прикладная химия», а также задачами, стоящими перед Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова по реализации Программы развития МГУ.

Программу составили: *Проф., д.х.н. Д.А. Леменовский,*
доц. к.х.н Д.М. Ройтерштейн

Зав. кафедрой фундаментальных проблем химии _____

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Государственного образовательного стандарта (ГОС ВПО) для специальности 020101 «Химия» с учетом развития современных представлений о молекулярных неорганических соединениях, их молекулярном и электронном строении. Реализация этой программы позволит сформировать у студентов основы фундаментальных представлений и понятий современной неорганической химии, а также повысить эффективность преподавания химических дисциплин на последующих курсах.

Основной целью учебной дисциплины «Теоретическая неорганическая химия» является ознакомление с современными представлениями о молекулярных неорганических соединениях, их молекулярном и электронном строении. Особое внимание уделяется рассмотрению важнейших закономерностей строения и реакционной способности неорганических соединений.

Основными задачами дисциплины являются:

- ознакомление с основными направлениями развития современной неорганической химии;
- ознакомление с важнейшими принципами реакционной способности молекулярных неорганических соединений;
- изучение основных фундаментальных представлений неорганической химии;
- формирование целостных представлений о структуре, свойствах и реакционной способности неорганических соединений.

Курс "Теоретическая неорганическая химия" читается в 1 и 2 семестрах. Учет успеваемости студентов ведется по принятой в университете системе.

2. КОМПЕТЕНЦИИ БАКАЛАВРА В ОБЛАСТИ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

В результате изучения дисциплины «Теоретическая неорганическая химия» студент должен:

- иметь представление об основных принципах строения и реакционной способности неорганических соединений,
- иметь представления о важнейших принципах реакционной способности молекулярных неорганических соединений;
- знать и уметь анализировать свойства молекулярных неорганических соединений в рамках современных представлений о методах ВС, МО;
- знать основы теории и положения современной неорганической химии.

Освоение дисциплины базируется на знаниях, полученных при изучении программы по химии общеобразовательной школы.

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих компетенций.

2.1. Общекультурные:

- владеет культурой мышления, способен к обобщению анализу, восприятию информации, постановке цели и выбору путей ее достижения (ОК-1); умеет использовать нормативные правовые документы в своей деятельности (ОК-6); стремится к саморазвитию, повышению своей квалификации и мастерства; способен приобретать новые знания в области техники и технологии, математики, естественных, гуманитарных, социальных и экономических наук (ОК-7); - способен работать с информацией в глобальных компьютерных сетях (ОК-12).

2.2. Профессиональные:

понимает сущность и социальную значимость профессии, основных перспектив и проблем, определяющих конкретную область деятельности (ПК-1); владеет основами теории фундаментальных разделов химии (прежде всего неорганической, аналитической, органической, физической, химии высокомолекулярных соединений, химии биологических объектов, химической технологии) (ПК-2); способностью применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных (ПК-3); способен планировать и проводить физические и химические эксперименты, проводить обработку их результатов и оценивать погрешности, математически моделировать физические и химические процессы и явления, выдвигать гипотезы и устанавливать границы их применения (ПК-15); способен использовать знание свойств химических элементов, соединений и материалов на их основе для решения задач профессиональной деятельности (ПК-17); способен разрабатывать проекты (в составе авторского коллектива) (ПК-26); готов использовать информационные технологии при разработке проектов (ПК-27).

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ.

Вид учебной работы	Зач.ед. - 6	Семестр	
		1	2
Общая трудоемкость дисциплины	270	135	135
Аудиторные занятия			
Лекции:	68	34	34
Практические занятия (ПЗ)	68	34	34
Семинары (С)			
Лабораторные работы (ЛР)			
и (или) другие виды аудиторных занятий			
Самостоятельная работа	134	72	72
Курсовой проект (работа)			
Расчетно-графические работы			
Реферат			
и (или) другие виды самостоятельной работы	100		
Подготовка к экзамену	34	17	Ё7
Вид итогового контроля: (экзамен, зачет)		Зачет, экзамен	Зачет, экзамен

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ.

№ п/п	Раздел дисциплины	Часов			
		Всего	Лекции	Практические (семинарские) занятия	Самостоятельная работа
Тема 1	Электронное строение вещества	20	4	6	10
Тема 2	Ионная связь	18	6	4	8
Тема 3	Природа ковалентности	22	6	6	10
Тема 4	Ковалентные соединения неметаллов с кратными связями элемент-элемент	16	4	4	8
Тема 5	Соединения с промежуточным типом химической связи	16	4	4	8
Тема 6	Химия водных и неводных растворов	16	4	4	8
Тема 7	Теория химической связи в соединениях переходных	26	6	6	14

	металлов				
Тема 8	“Несвязывающие электроны”, их влияние на свойства ковалентных молекулярных соединений переходных металлов.	18	4	6	8
Тема 9	Сэндвичевые комплексы; карбонильные производные-органические соединения.	18	6	4	8
Тема 10	Устойчивость ковалентных соединений переходных металлов	16	4	4	8
Тема 11	Представления о каркасных и кластерных соединениях	18	4	4	10
Тема 12	Соединения ранних переходных металлов III, IV и V групп	12	4	2	6
Тема 13	Соединения металлов середины переходных рядов (IV и VII группы и подгруппа железа).	16	4	4	8
Тема 14	Соединения поздних переходных металлов (подгруппы кобальта, никеля и меди)	16	4	4	8
Тема 15	Лантаноиды и актиноиды (f-элементы)	10	2	2	6
Тема 16	Невалентные взаимодействия	12	2	4	6
	Итого	270	68	68	134

4.2. Содержание разделов дисциплины

1. Электронное строение вещества

Разделение ядерного и электронного движения. Волновые функции, электронные состояния. Правило Хунда для атомов и молекул. Представление об орбиталях, симметрия орбиталей. Размеры атомов и ионов. Энергия ионизации и сродство к электрону. Периодическая система элементов.

2. Ионная связь

Типы ионных решеток. Проблемы существования “обособленных молекул с ионными связями внутри молекул”. Константа Маделунга. Энергия кристаллической решетки. Цикл Борна-Габера. Термодинамика ионных решеток. Область существования ионных соединений. Стехиометрия и стереохимия соединений с ионным типом связей. Модель жестких сфер. Влияние поляризуемости электронных оболочек на строение и свойства ионных решеток. Термодинамические и кинетические закономерности поведения соединений с ионным типом связей. Водные растворы; растворы в аммиаке, электриды, расплавы. Представления о ионных парах. Соединения со сложными катионами и анионами.

3. Природа ковалентности

Соединения с типичными ковалентными связями. Геометрические структуры ковалентных соединений. Направление валентных связей. Простейшие теоретические модели, описывающие строение ковалентных соединений. Метод молекулярных орбиталей. Диамагнитные и парамагнитные молекулы. Бирадикалы и триплетные состояния. Двухцентровые и многоцентровые молекулярные орбитали. Закономерности геометрического строения многоатомных нелинейных молекул. Модель отталкивания электронных пар валентной оболочки. Представление Гиллеспи ОЭПВО. Представление о s- и p-связях. Гибридизационные представления. Теория резонанса. Распределение электронов в молекулах; степени окисления атомов. Размеры атомов в молекулах. Химическая связь в простейших химических электроноизбыточных и электронодефицитных молекулах (B, Al, P, S). Закономерности строения и поведения соединений с одинарными ковалентными связями.

4. Ковалентные соединения неметаллов с кратными связями элемент-элемент

Соединения элементов II периода. Углеводороды с кратными связями углерод-углерод: C=C и C₂C₂. Кислородные соединения неметаллов. Молекула азота и ее аналоги: C=O и ацетилен. Соединения тяжелых элементов III-V периодов с кратными связями элемент-элемент: Si=Si; Ge=Ge; Sn=Sn, P=P и др. Геометрические параметры; конформация молекул; проблема диамагнетизма и парамагнетизма.

5. Соединения с промежуточным типом химической связи

Ковалентная сильно полярная связь. Соединения бора и алюминия. Простейшие представители. Самоассоциации соединений. Структура в зависимости от присоединенных групп. Энергия ассоциации и разложение ее на энергии отдельных связей. Динамические превращения соединений в растворах и твердой фазе.

6. Химия водных и неводных растворов

Необычные свойства воды; водородная связь. Соединения с водородной связью. Протонные и апротонные растворители. Неполярные растворители. Сольватация ионов и нейтральных молекул; энергия сольватации. Термодинамика процесса растворения; энтропийный взгляд.

7. Теория химической связи в соединениях переходных металлов
Природа связи и энергия связи; ионная модель и вклад ковалентной составляющей. Теория кристаллического поля. Сильное и слабое поле. Октаэдрические, тетраэдрические и плоскоквадратные комплексы. Спектрохимический ряд. Магнитные и спектральные свойства. Учет ковалентной составляющей связи металл-лиганд. Теория поля лигандов - эквивалент метода МО для комплексов переходных металлов; модель углового перекрытия. Причина “бесполезности” ТКП для непереходных элементов.
8. “Несвязывающие электроны”, их влияние на свойства ковалентных молекулярных соединений переходных металлов.
9. Сэндвичевые комплексы; карбонильные производные-органические соединения.
10. Устойчивость ковалентных соединений переходных металлов
Устойчивость молекул в газовой и конденсированной фазах. Квантово-химическая устойчивость. Термодинамическая и кинетическая устойчивость. Хелат-эффект. Изомерия комплексов.
11. Представления о каркасных и кластерных соединениях
Симметрия молекул. Модели электронного строения. Сходство и различие в строении соединений переходных и непереходных элементов. Бесконечные решетки и их отличие от кластерных соединений. Решетки пониженной размерности; одно- и двумерные соединения.
12. Соединения ранних переходных металлов III, IV и V групп
13. Соединения металлов середины переходных рядов (IV и VII группы и подгруппа железа).
14. Соединения поздних переходных металлов (подгруппы кобальта, никеля и меди)
Общее содержание пп.12, 13 и 14:
Монометаллические галогениды и халькогалогениды
Получение, строение и свойства
Производные с кислород- и азотсодержащими лигандами
Полиядерные кластерные соединения: условия возникновения, строение, свойства
Органические комплексные соединения, типы соединений, синтез, строение и свойства
Полиядерные соединения
15. Лантаноиды и актиноиды (f-элементы)
Свойства атомов и ионов. Комплексные и металлоорганические соединения. Электронное строение, природа связи, спектральные и магнитные характеристики.
16. Невалентные взаимодействия
Межмолекулярные силы. Кулоновские взаимодействия. Ион-дипольные, ион-ионные взаимодействия. Дисперсные силы. Отталкивание электронных оболочек как внутри- и межмолекулярный структурообразующий фактор. Ионные, ковалентные и Ван-дер-ваальсовы радиусы. Типы и энергии внутримолекулярных и межмолекулярных невалентных взаимодействий. Влияние внутримолекулярных невалентных взаимодействий на геометрию молекул; конформации и конфигурации молекул. Проявление невалентных взаимодействий в свойствах веществ.

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ (СЕМИНАРСКИЕ) ЗАНЯТИЯ

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических (семинарских) занятий
1	1	Представления о электронном строении атома, атомных орбиталях, s-, p-, d- орбитали. Энергия ионизации, сродства к электрону. Электроотрицательность.
2	1	Соединения с преимущественно ионным типом связи, представления о ионных радиусах. Поведение соединений с ионным типом связи в различных фазах.
3	2	Двухатомные молекулы соединений с ковалентной связью. Применение методов ВС и МО ЛКАО для описания химической связи в таких соединениях. Связывающие, разрыхляющие и несвязывающие орбитали. Энергетические диаграммы МО двухатомных молекул (H_2 , Li_2 , B_2 , C_2 , N_2 , O_2 , F_2 , HF , CO , NO).
4	2	Роль симметрии в химии. Элементы симметрии и операции симметрии. Зеркальная плоскость, поворотная ось, зеркально-поворотная ось, центр инверсии. Точечные группы симметрии. Номенклатура Шенфлиса. Алгоритм определения точечной группы симметрии. Представления группы. Неприводимые представления. Таблицы характеров и их использование. Формула приведения. Оператор проектирования.
5	2	Построение энергетических диаграмм МО многоатомных молекул (H_2O , NH_3 , CH_4 , SO_2 , SO_3 , CO_2 и аналогичных молекул). Вырожденные орбитали.
6	3	Орбитальнодефицитные и электронодефицитные соединения. Четырехэлектронная трехцентровая связь и двухэлектронная трехцентровая связь, их отличие от двухэлектронной двухцентровой связи (HF_2^- , SF_6 , PF_5 , B_2H_6 , Al_2Me_6 , Al_2Cl_6).
7	7	Теория кристаллического поля, ее использование для описания свойств координационных соединений, границы применимости. Спектрохимический ряд, примеры лигандов сильного и слабого поля.
8	7	Применение метода МО для описания химической связи в координационных соединениях переходных металлов. Плоскоквадратные, тетраэдрические и октаэдрические комплексы. Представления о π -связывании в координационных соединениях.
9	7	Сравнение подходов ТКП и метода МО к описанию координационных соединений.
10	9	Карбонилы металлов, их электронное и геометрическое строение, типы координации CO, особенности связи M-CO

		и реакционная способность. Представления об электронном и геометрическом строении нитрозильных и карбеновых комплексов.
11	10, 11	Олефиновые комплексы переходных металлов, их электронное и геометрическое строение.
12	12, 14	Сэндвичевые соединения переходных металлов, электронное строение в рамках метода МО, реакционная способность металлоценов в зависимости от их положения в таблице Менделеева.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ.

9.1. Рекомендуемая литература.

А) Основная литература:

1. Housecroft C.E., Sharpe A.G. Inorganic Chemistry, 2-nd Ed., N.Y., Prentice Hall 2005.
2. Шрайвер Д., Эткинс П. Неорганическая химия. М, Мир 2004
3. Хьюи Дж. Неорганическая химия. М. Химия 1987
4. Колмен Дж., Хигедас Л., Нортон Дж., Финке Р. «Металлоорганическая химия переходных металлов», М, Мир, 1989
5. Харгиттаи И., Харгиттаи М, Симметрия глазами химика М, Мир, 1989
6. Ф. Коттон, Дж. Уилкинсон, «Современная неорганическая химия», в трех томах, «Общая теория», М, Мир, 1969.

Б) Дополнительная литература:

1. Cotton F.A. Chemical application of group theory 3-rd Ed. N.Y., A Willey-Interscience Publication 1990
2. Эткинс П. Физическая химия М, Мир 1980
3. К. Эльшенбройх, «Металлоорганическая химия», М, «Бином. Лаборатория знаний», 2011
4. F. A. Cotton, G. Wilkinson, «Advanced inorganic chemistry», 6th Edition.

9.2. Средства обеспечения освоения дисциплины.

Студентам раздаются учебники и диски с учебными, учебно-методическими и информационными материалами, а также таблицы характеров неприводимых представлений.