

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Кубанский государственный университет»
Факультет химии и высоких технологий



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе, качеству образования – первый проректор

Хагуров Т.А.

Подпись

2018 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.ДВ.02.01 «ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ КООРДИНАЦИОННЫХ
СОЕДИНЕНИЙ»

Направление подготовки - 04.04.01 Химия

Направленность - неорганическая химия

Программа подготовки – академическая


Форма обучения – очная

Квалификация выпускника - магистр

Краснодар 2018

Рабочая программа дисциплины «Электронное строение координационных соединений» составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования, утвержденным приказом Минобрнауки России от 23.09.2015 № 1042 по направлению подготовки 04.04.01 – Химия, направленность – неорганическая химия

Программу составил

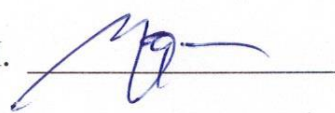
д.х.н., профессор кафедры общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии Буков Н.Н. 

Заведующий кафедрой

д.х.н., профессор Буков Н.Н.  « 08 » апреля 2018 г.

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии

« 10 » апреля 2018 г., протокол № 8

Заведующий кафедрой д.х.н., профессор Буков Н.Н. 

Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии и высоких технологий «20» апреля 2018 г., протокол № 5

Председатель УМК факультета доцент Стороженко Т.П. 

Эксперты:

Н.Н. Петров, генеральный директор ООО «Интеллектуальные композиционные решения», кандидат химических наук, доцент

В.А. Исаев, Зав. кафедрой теоретической физики и компьютерных технологий КубГУ, д-р физ.-мат. наук, доцент

1 Цели и задачи изучения дисциплины

Преподавание курса «Электронное строение координационных соединений» имеет целью дать студенту понимание теоретических основ электронного строения координационных соединений, умение интерпретировать и грамотно оценивать экспериментальные данные, в том числе публикуемые в научной литературе.

Данная дисциплина служит теоретической базой для понимания многих химических процессов, а также позволяет интерпретировать данные по процессам синтеза новых неорганических материалов, в том числе и наноматериалов.

1.1 Цель дисциплины

Целью изучения данной дисциплины является формирование у студентов базовых теоретических представлений об электронном строении координационных соединений.

1.2 Задачи дисциплины

В результате изучения данной дисциплины студенты должны

1) *знать:*

- классификацию и характеристику физических методов исследования;
- теоретические основы спектральных и спектроскопических методов;
- проблемы получения и регистрации спектров;
- методы определения энергетических и геометрических параметров молекул и веществ;
- методы электронной, колебательной, ЯМР и масс-спектропии;
- принципы работы серийных спектральных приборов;
- стратегию применения физических методов исследования при идентификации и количественном анализе химических соединений и их смесей.

2) *уметь:*

- выбирать оптимальные физические методы исследования конкретных химических соединений и веществ;
- интерпретировать спектральные данные электронной, колебательной, ЯМР и масс-спектропии;
- готовить исследуемые вещества для спектрального анализа в выбранном диапазоне электромагнитных волн;
- идентифицировать химические соединения по данным спектральных методов анализа;
- применять данные методов электронной, колебательной, ЯМР и масс-спектропии при исследовании химических процессов.

1.3 Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к дисциплинам по выбору вариативной части учебного плана. Для успешного освоения данной дисциплины необходимы знания по курсам: «Строение вещества» и «Высшая математика». Дисци-

плина является базовой для изучения курса « Теоретические закономерности и стратегия синтеза новых неорганических материалов.

Знания, приобретенные при освоении данного курса, будут использованы при решении структурных задач выпускных квалификационных работ (магистерских диссертаций) по неорганической химии.

1.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине «Электронное строение координационных соединений», соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Изучение данной учебной дисциплины направлено на формирование у обучающихся следующих компетенций: ОК-3, ПК-2 и ПК-3

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
1.	ОК-3	владением навыками проведения химического эксперимента, основными ... аналитическими методами ... исследования химических веществ ...	классификацию и характеристику методов молекулярной спектроскопии; теоретические вопросы молекулярной спектроскопии на качественном уровне	выбирать оптимальные методы молекулярной спектроскопии для исследования неорганических и координационных соединений переходных элементов	методологией молекулярной спектроскопии неорганических и координационных соединений переходных элементов
2	ПК-2	способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	стратегию применения методов молекулярной спектроскопии при идентификации и качественном анализе неорганических и координационных	применять данные методов молекулярной спектроскопии при исследовании химических процессов неорганических и координационных соединений	методологией исследования химических процессов и строения неорганических и координационных соединений переходных элементов мето-

№ п.п	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
			ных соединений переходных элементов		дами молекулярной спектроскопии
3	ПК-3	владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	приборную базу молекулярной спектроскопии	подготовить образцы неорганических и координационных соединений и записать их молекулярные спектры	методологией молекулярной спектроскопии неорганических и координационных соединений переходных элементов

2. Структура и содержание дисциплины

2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 4 зач.ед. (144 часа), их распределение по видам работ представлено в таблице.

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры			
		А			
Контактная работа, в том числе	72,2	72,2			
Аудиторные занятия (всего)					
В том числе:					
Занятия лекционного типа	18	18			
Лабораторные занятия	54	54			
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия, практикумы, лабораторные работы, коллоквиумы и иные аналогичные занятия)	-	-			
Иная контактная работа	0,2	0,2			
Контроль самостоятельной работы (КСР)	-	-			
Промежуточная аттестация (ИКР)	0,2	0,2			
Самостоятельная работа, в том числе	71,8	71,8			
Курсовая работа	-	-			

Проработка учебного материала		71,8	71,8			
Выполнение индивидуальных заданий		-	-			
Реферат		-	-			
Контроль		-	-			
Подготовка к экзамену		-	-			
Общая трудоемкость	час.	144	144			
	в том числе контактная работа	72,2	72,2			
	зач. ед	4	4			

2.2 Структура дисциплины:

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам дисциплины.

Разделы дисциплины, изучаемые в семестре А

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			СРС
			Л	ПР	ЛР	
1	Введение.	5,8	2	-	2	1,8
2	Образование комплексных соединений	44	4	-	16	22
3	Химическая связь в комплексных соединениях и их электронное строение	44	4	--	16	24
4	Электронные спектры комплексных соединений переходных металлов	52	8	-	20	24
	<i>Всего:</i>		18	-	54	71,8

2.3 Содержание разделов дисциплины: «Электронное строение координационных соединений»

2.3.1 Занятия лекционного типа

№ раздела	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1	Введение.	Особенности строения координационных соединений. Номенклатура комплексных соединений	Т
2	Образование комплексных соединений	Классификация комплексных соединений и лигандов. Координационное число и дентантность. Типы доноров. Полимерные координационные соединения. Мостиковые группы. Виды химических связей в комплексных соединениях. Стереохимия комплексных соединений.	ЛР
3	Химическая связь в комплексных соединениях и их электронное строение	Ранние теории химической связи. Метод валентных связей. Гибридизация. Магнитные свойства комплексных соединений. Пространственное строение комплексных соединений. Недостатки теории Полинга. Теория кристаллического поля Бете-Ван Флека, классификация d-орбиталей. Спектрохимический ряд. Магнитные свойства комплексных соединений. Высокоспиновые и низкоспиновые комплексные соединения. Устойчивость комплексных соединений, энтальпии гидратации как функция электронного строения комплексных соединений. Энергия стабилизации кристаллическим полем. Наиболее типичные координационные числа октаэдрические и тетраэдрические комплексные соединения.	ЛР, К

		Факторы, влияющие на выбор структур.	
4	Электронные спектры комплексных соединений переходных металлов	Электронные спектры d^1 -ионов. Интенсивность полос в спектрах поглощения. Электронные конфигурации ионов d^n . Схема Рассела-Саундерса. Взаимодействие электронных спинов. Взаимодействие орбитальных моментов количества движения. Мультиплетность. Энергии термов свободных ионов. Спектры комплексных ионов. Метод слабого поля. Диаграммы Оргела. Метод сильного поля. Диаграммы Танабе-Сугано. Параметры Рака. Особенности спектров поглощения f-элементов. Сверхчувствительные переходы. Спектрографический метод и его применение.	Т

2.3.2 Занятия семинарского типа

Занятия семинарского типа - не предусмотрены

2.3.3 Лабораторные занятия

№	Наименование раздела	Наименование лабораторных работ	Форма текущего контроля
1.	Введение.	Техника безопасности при работе в химической лаборатории.	УО
2.	Образование комплексных соединений	Исследование реакции аквагидратации зеленого изомера хлорида хрома(III)	ЛР
3.	Химическая связь в комплексных соединениях и их электронное строение	Теория Джада-Оффелта, метод СЧП и его практические приложения	ЛР
4.	Электронные спектры комплексных соединений	Интерпретация спектров поглощения комплексных соединений переходных металлов на основе теории кристаллического поля и теории поля лигандов	ЛР

	переходных металлов	Особенности спектров поглощения f- элементов как функция их электронного строения	ЛР
--	---------------------	---	----

2.3.4 Примерная тематика курсовых работ

Проведение курсовых работ по дисциплине – не предусмотрено

2.4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

№	Наименование раздела	Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины по выполнению самостоятельной работы
1	2	3
5.	Введение	Буков Н.Н., Кузнецова С.Л., Костырина Т.В. Физические методы исследования. Молекулярная спектроскопия. Уч. пособие, КубГУ, http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/MOLEKULYRNAYSPEKTROSKOPIY_6.pdf
6.	Образование комплексных соединений	Киселев Ю.М., Добрынина Н.А. Химия координационных соединений: учебное пособие для студентов вузов, М.: Академия. 2008, 342с.
7.	Химическая связь в комплексных соединениях и их электронное строение	Буков Н.Н., Буикликий В.Д., Панюшкин В.Т. Физические методы исследования координационных соединений редкоземельных элементов. Краснодар, КубГУ «Книга», 2001
8.	Электронные спектры комплексных соединений переходных металлов	Буков Н.Н., Кузнецова С.Л., Костырина Т.В. Физические методы исследования: Электронная спектроскопия. – Краснодар: КубГУ, 2006. стр. 32-36

3. Образовательные технологии

Семестр	Вид занятия (Л, ПР, ЛР)	Используемые интерактивные образовательные технологии	Количество часов
4	Л	электронные презентации	16
	ПР	-	
	ЛР	решение проблемных ситуаций в составе малых групп.	16
Итого:			32

4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Текущий контроль осуществляется в устной и электронной форме в процессе выполнения лабораторных работ. Промежуточный контроль проводится в виде тестов и опроса. Итоговый контроль осуществляется приемом зачета в семестре А.

Критерии оценки сформированных компетенций определяются уровнем усвоения изучаемого материала

- обучаемый имеет определенное представление о физических методах исследования неорганических и композитных материалов, но не проявляет их должной осмысленности и не справляется с выполнением соответствующих письменных и экспериментальных работ (**не зачтено, неуд.**);
- обучаемый имеет четкие представления о физических методах исследования неорганических и композитных материалов, понимает их сущность, однако обнаруживает затруднение в их воспроизведении и применении на практике, что приводит к необходимости уточняющих и дополнительных вопросов в процессе проверки (**зачтено, удовл.**);
- обучаемый достаточно полно осмыслил материал о физических методах исследования неорганических и композитных материалов, с пониманием формулирует соответствующие понятия (теоретические положения), хотя при их обосновании и воспроизведении нуждается в некоторых уточнениях, обнаруживает умение применять усвоенные знания на практике, допуская мелкие, несущественные недочеты в письменных работах (**зачтено, хор.**);
- высший уровень владения материалом состоит в глубоком осмыслении физических методов исследования неорганических и композитных материалов на понятийном уровне, в умении свободно и логично воспроизводить и обосновывать содержащиеся в них положения примерами и фактами, а также не допускать ошибок при выполнении письменных и практических работ, проявлять самостоятельность и элементы творчества (**зачтено, отл.**).

Студенты, успешно выполнившие лабораторный практикум, аттестуются досрочно.

4.1 Фонд оценочных средств для проведения текущей аттестации

ЗАДАЧИ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ № 1

по курсу «Электронное строение координационных соединений»
см. Методические указания №2 - Буков Н.Н., Кузнецова С.Л., Костырина Т.В.
Физические методы исследования: Электронная спектроскопия. – Краснодар: КубГУ, 2006. стр. 32-36

ЗАДАЧИ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ № 2

по курсу «Электронное строение координационных соединений»

см. Методические указания №4 - Буков Н.Н., Колоколов Ф.А., Костырина Т.В., Кузнецова С.Л. Физические методы исследования: Колебательная спектроскопия. Уч. пособие, КубГУ, Краснодар, 2010. стр. 40-45

ЗАДАЧИ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ № 3

по курсу «Электронное строение координационных соединений»

см. Методические указания №5 - Буков Н.Н., Костырина Т.В., Кузнецова С.Л., Буикликий В.Д. Физические методы исследования. Часть 3. Спектроскопия ЯМР (^1H). Краснодар, ООО «Просвещение-Юг», 2000. стр. 40-45

4.2 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Вопросы к экзамену

1. Особенности номенклатуры и терминологии координационных соединений.
2. Классификация комплексных соединений и лигандов.
3. Координационное число и дентантность.
4. Типы доноров.
5. Полимерные координационные соединения.
6. Виды химических связей в комплексных соединениях.
7. Стереохимия комплексных соединений.
8. Ранние теории химической связи. Недостатки теории Косселя.
9. Метод валентных связей.
10. Гибридизация.
11. Пространственное строение комплексных соединений.
12. Недостатки теории Полинга.
13. Теория кристаллического поля Бете-Ван Флека, классификация d-орбиталей.
14. Спектрохимический ряд.
15. Магнитные свойства комплексных соединений.
16. Высокоспиновые и низкоспиновые комплексные соединения.
17. Устойчивость комплексных соединений.
18. Энергия стабилизации кристаллическим полем.
19. Наиболее типичные координационные числа октаэдрические и тетраэдрические комплексные соединения.
20. Комплексные соединения с координационным числом 2. Диаграммы уровней энергии молекулярных орбиталей для линейных комплексов ML_2 .
21. Комплексные соединения золота и серебра.
22. Координационное число 3. Особенности лигандов образующих комплексные соединения с координационным числом 3 диаграммы молекулярных орбиталей для комплексных соединений ML_3 .
23. Координационное число 5 и их пространственное строение.
24. Факторы определяющие структуру координационных соединений.
25. Основные типы пространственных полиэдров для молекул с координа-

- ционным числом 5 (тригональная бипирамида и тетрагональная пирамида).
26. Описание электронного строения бипирамиды при помощи набора гибридных орбиталей.
 27. Факторы, влияющие на выбор структур.
 28. Электронные спектры d^1 -ионов.
 29. Интенсивность полос в спектрах поглощения.
 30. Электронные конфигурации ионов d^n .
 31. Схема Рассела-Саундерса.
 32. Взаимодействие электронных спинов.
 33. Взаимодействие орбитальных моментов количества движения. Мультиплетность.
 34. Энергии термов свободных ионов.
 35. Спектры комплексных ионов.
 36. Метод слабого поля. Диаграммы Оргела.
 37. Метод сильного поля. Диаграммы Танабе-Сугано.
 38. Параметры Рака.
 39. Особенности спектров поглощения f-элементов.
 40. Сверхчувствительные переходы.
 41. Спектрографический метод и его применение

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

5.1 Основная литература:

1. Лебухов В.И. Физико-химические методы исследования [Электронный ресурс]: Учебник / В.И. Лебухов, А.И. Окара, Л.П. Павлюченкова; под ред. А.И. Окара. – СПб.: Издательство «Лань», 2012. – 480 с. : ил. – (Учебник для вузов. Специальная литература). – ISBN: 978-5-8114-1320-1. – Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/4543#book_name
2. Пентин, Ю.А. Физические методы исследования в химии [Текст] : Учебник для студентов вузов. - М.: Изд-во "МИР" Изд-во "АСТ", 2003. – 683 с. : ил. - (Методы в химии). - Библиогр. : с. 658-661. - ISBN 5030034706. - ISBN 5170187602 : 358.00.
3. Буков, Н.Н. Физические методы исследования: колебательная спектроскопия [Текст] : учебное пособие / Н. Н. Буков, Ф. А. Колоколов, Т. В. Костырина, С. Л. Кузнецова ; М-во образования и науки Рос. Федерации, Кубанский гос. ун-т. - Краснодар : [Кубанский государственный университет], 2010. - 53 с. : ил. - Библиогр. : с. 46. - 8 р. 45 к.

5.2 Дополнительная литература:

1. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Бином, М., 2010
2. Грибов Л.А. Квантовая механика. Строение молекул. М., Наука, 2008
3. Степанов Н.Ф.. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, 2001.
4. Баличева Т.Г., Лобанева О.А. Электронные и колебательные спектры

- неорганических и координационных соединений. Л. 1983г.
5. Буков Н.Н., Буиклиский В.Д., Панюшкин В.Т. Физические методы исследования координационных соединений редкоземельных элементов. Краснодар, КубГУ «Книга», 2001
 6. М. Тоуб Механизмы неорганических реакций. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. 2012. 312 с.

5.3. Периодические издания:

«Журнал Общей химии»,
 «Журнал Прикладной спектроскопии»,
 «Координационная химия»,
 «Журнал Структурной химии»,
 «Российский химический журнал» и др.

6. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети

«Интернет», необходимых для освоения дисциплины

<http://chemistry.ru/>

<http://www.himhelp.ru/>

<http://www.nglib.ru>.

<http://www.xumuk.ru/>

<http://webbook.nist.gov/chemistry/>

http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/cre_frame_disp.cgi?sdbno=19659

<http://www.biblioclub.ru/>

<http://kubsu.ru/University/departments/CHEM/inorg/index.php> и др.

Интернет сайты ведущих государственных ВУЗов и научных организаций РФ: МГУ, СПбГУ, РХТУ, НГУ, КубГУ, РАН РФ и др.

Зарубежные ведущие научные и учебные центры: NBS USA, MTI UK, ChLab Japan, NSRDS и др.

Интерактивная база данных книг и журналов SpringerLink.

Химический редактор ChemSketch:<http://www.acdlabs.com>

7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

№	Наименование раздела	Формы самостоятельной работы	Формы отчетности
1	Введение	Актуализация содержания тем изучаемой дисциплины	УО
2	Образование комплексных соединений	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к лабораторным занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	УО, ЛР
3	Химическая связь в	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к лабораторным занятиям.	УО, ЛР

	комплексных соединениях и их электронное строение	Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	
4	Электронные спектры комплексных соединений переходных металлов	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к лабораторным занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	УО, ЛР

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю) (при необходимости)

8.1 Перечень необходимого программного обеспечения

В курсе лабораторных работ используется следующее программное обеспечение: Microsoft Office (Word, Excel), ACD Labs Chems sketch, Компьютерная программа Hyper Chemistry .

8.2 Перечень необходимых информационных справочных систем

1. КонсультантПлюс//www.consultant.ru
2. Федеральный центр информационно-образовательных ресурсов. URL: <http://fcior.edu.ru/>.
3. Российский образовательный портал. URL: <http://www.school.edu.ru/>

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Для материально-технического обеспечения дисциплины «Электронное строение координационных соединений» используется лабораторное оборудование и учебно-научная аппаратура (интерактивная доска, демонстрационные модели).

При выполнении лабораторных работ для реализации методик используются: спектрофотометры, инвентарь изготовления паст и таблеток исследуемых соединений, весы аналитические. При проведении лабораторных работ используются химические реактивы и посуда.

ПЭВМ уровня не ниже Pentium IV с операционной системой Windows XP / Windows 7, Компьютерная программа Hyper Chemistry.

	Вид работ	Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля) и оснащенность
1.	Лекционные занятия	Лекционная аудитория 422С, оснащенная презентационной техникой и соответствующим программным обеспечением.

2.	Семинарские занятия	-
3.	Лабораторные занятия	Аудитория 422С, оснащенная презентационной техникой и соответствующим программным обеспечением и лаборатории факультета, укомплектованные специализированной мебелью и техническими средствами обучения.
4.	Курсовое проектирование	-
5.	Групповые (индивидуальные) консультации	Аудитория 422С, оснащенная презентационной техникой и соответствующим программным обеспечением.
6.	Текущий контроль, промежуточная аттестация	Аудитория 422С, оснащенная презентационной техникой и соответствующим программным обеспечением.
7.	Самостоятельная работа	Кабинет для самостоятельной работы, оснащенный компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет», программой экранного увеличения и обеспеченный доступом в электронную информационно-образовательную среду университета.