

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Таюрский Д.А.

_____ 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Кластеры - современный подход в химии координационных соединений Б1.В.ДВ.6

Направление подготовки: 04.03.01 - Химия

Профиль подготовки: Неорганическая химия

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Чевела В.В.

Рецензент(ы):

Амиров Р.Р.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Амиров Р. Р.

Протокол заседания кафедры No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Регистрационный No 7104117

Казань
2017

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) доцент, д.н. (профессор) Чевела В.В. Кафедра неорганической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова, Vladimir.Chevela@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Описание сложных координационных соединений - кластеров с использованием современных о представлений о химической связи

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.В.ДВ.6 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 04.03.01 Химия и относится к дисциплинам по выбору.

Осваивается на 4 курсе, 8 семестр.

Дисциплина 'Кластеры - современный подход в химии координационных соединений' относится к вариативной части блока дисциплин Б1 (курсы по выбору студентов). Она базируется на знаниях и умениях, выработанных при прохождении общих профессиональных курсов базовой части цикла СЗ 'Неорганическая химия', 'Органическая химия'.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-6 (общекультурные компетенции)	способностью работать в коллективе, толерантно воспринимать социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия
ОК-7 (общекультурные компетенции)	способностью к самоорганизации и самообразованию
ОПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач
ОПК-3 (профессиональные компетенции)	способностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности
ПК-3 (профессиональные компетенции)	владением системой фундаментальных химических понятий

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

Типы химической связи в координационных соединениях и металлических кластерах переходных элементов, способы получения кластеров

2. должен уметь:

Уметь разрабатывать приемы синтеза кластерных соединений с заданными свойствами и ядерностью.

3. должен владеть:

Владеть способами применения кластерных соединений в технологических и научных целях

4. должен демонстрировать способность и готовность:

применить кластерные соединения в технологических и научных целях

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 8 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. формирование химии кластеров.	8	1,2	0	4	0	
2.	Тема 2. Классификация кластерных соединений металлов	8	3,4	0	4	0	
3.	Тема 3. формирование химии кластеров Как самостоятельного научного направления.	8	5,6	0	4	0	
4.	Тема 4. Объекты исследования. Некоторые определения.	8	7,8	0	4	0	
5.	Тема 5. Концепция плотной упаковки лигандов на по-верхности металлического остова.	8	9,10	0	4	0	Тестирование
6.	Тема 6. Лиганды в кластерных соединениях. Номенклатура.	8	11,12	0	4	0	
7.	Тема 7. Электронное строение кластерных соединений.	8	13,14	0	4	0	

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
8.	Тема 8. Правило 18 электронов, скелетных электронных пар. Металлоциклы	8	15,16	0	4	0	Письменное домашнее задание
9.	Тема 9. Металлополиэдров. Электронное строение тетраэдрических и октаэдрических кластерных соединений	8	17,18	0	4	0	Контрольная работа
	Тема . Итоговая форма контроля	8		0	0	0	Зачет
	Итого			0	36	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. формирование химии кластеров.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Содержание понятия ?кластерное соединение.Кластерное соединение ? изолированная группа, содержащая связи металл-металл. Кластерные материалы ? полимеры с кластерными группами. Ультрадисперсные металлические частицы с диаметром ~300А называют иногда ?безлигандные металлические кластеры?. Кластеры ? определенная ступень между молекулярными комплексами и ультрадисперсными частицами. Относительная устойчивость ультрадисперсных частиц. Теория Киперта в описании структуры кластеров

Тема 2. Классификация кластерных соединений металлов

практическое занятие (4 часа(ов)):

Правильные полиэдры. Полуправильные полиэдры. Полуправильные полиэдры-призмы, антипризмы, полиэдры Архимеда. Неправильные полиэдры. Общее возможное число выпуклых неправильных полиэдров равно 92. У всех неправильных полиэдров грани представляют собой правильные многоугольники, но все они имеют вершины двух и более типов. Неправильные полиэдры особенно важны в химии соединений с нечетными координационными числами ? 5, 7, 9, 11. Группы неправильных полиэдров ? пирамиды, бипирамиды, одношапочные призмы, двухшапочные призмы, одношапочные антипризмы, двухшапочные антипризмы. Сфеноиды и бисфеноиды. Усеченные икосаэдры. Пять особых полиэдров ? двойная тригональная призма, тригональный додекаэдр, сфенокорона, капирированная сфенокорона, сфеномегакорона. ?Химические? координационные полиэдры. Геометрические последствия неэквивалентности вершин. Превращение несферических полиэдров в сферические. Искажения, обусловленные хелатированием. Описание моноядерных соединений (комплексов) с координационными числами 5-12 Семикоординационные соединения.Восьмикоординационные соединения.Десятикоординационные соединения. Двенадцатикоординатные соединения.

Тема 3. формирование химии кластеров Как самостоятельного научного направления.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Пространственные эффекты лигандов в кластерах. Понятие конического кластерного угла. Изучение закономерностей расположения различных лигандов на поверхности металлоостова. Типы лигандов в кластерных соединениях. Лиганды в кластерных соединениях могут иметь координацию вершинную, реберную, граневую, или внутривещную. В кластерных соединениях водород чаще всего бывает мостиковым лигандом, соединяющим два металла при различных типах реберной координации или три металла при граневой.

Тема 4. Объекты исследования. Некоторые определения.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Способы координирования олефиновых, ацетиленовых лигандов. Моно-би- три-тетраденатная координация. Возможности замещения карбонильных групп молекулами олефинов в карбонильных кластерах. Донорные возможности олефинов. Ацетиленовые лиганды. Симметричная и асимметричная координация грани. Внутривещные лиганды. Внутри полиэдра из атомов металла имеется полость, размеры которой зависят от типа полиэдра и радиуса атома металла. Данные полости способны занимать неметаллические элементы. Были получены соединения, содержащие в полостях H, C, N, S, P, As, Sb.

Тема 5. Концепция плотной упаковки лигандов на поверхности металлического остова.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Концепция плотной упаковки лигандов на поверхности металлического остова? Пространственные эффекты лигандов в кластерах. Понятие конического кластерного угла. Изучение закономерностей расположения различных лигандов на поверхности металлоостова привело к выводу о том, что кластерообразование состоит в создании на поверхности металлоостова плотноупакованной оболочки из лигандов. Лиганд экранирует часть пространства на поверхности металлоостова

Тема 6. Лиганды в кластерных соединениях. Номенклатура.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Кластеры- металлоцепи, металлоциклы. Металлоцепи ? гомо- и гетероэлементные, линейные и разветвленные. Линейные металло- цепи, содержащие переходные металлы. Общая черта всех этих соединений ? наличие центрального атома, геометрия связей которого определяет структуру всей цепи. Координация вокруг центрального атома может быть линейной, плоскоквадратной. Металлоцепи, содержащие переходные и непереходные элементы. Металлоцепи, содержащие только непереходные металлы. Разветвленные гетероэлементные цепи. Олигомерные и полимерные металлоцепи. Методы синтеза металлоцепей. Трехчленные металлоциклы, треугольные кластеры. Электронное строение трехчленных металлоциклов. Методы синтеза трехчленных металлоциклов. Четырехчленные и более крупные металлоциклы.

Тема 7. Электронное строение кластерных соединений.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Электронное строение кластерных соединений? Понятие о кластерных валентных электронах (КВЭ) и кластерных скелетных электронах (КСЭ). Общее число КВЭ вычисляют по следующей схеме ? к суммарному числу электронов валентной оболочки атомов остова прибавляется число электронов, поставляемых всеми лигандами + заряд с обратным знаком. Первоначально было введено понятие ?магических? чисел КВЭ как устойчивых характеристик кластеров, имеющих в основе полиэдр определенного типа. Так, для треугольных КВЭ = 48, для тетраэдров ? 60, для октаэдров ? 86. Теория молекулярных орбиталей в приложении к кластерным соединениям.

Тема 8. Правило 18 электронов, скелетных электронных пар. Металлоциклы

практическое занятие (4 часа(ов)):

Трехчленные металлоциклы, треугольные кластеры. Электронное строение трехчленных металлоциклов. ?Магическое? число КВЭ для трехчленных металлоциклов ? 48, при этом каждый атом приобретает 18-ти электронную конфигурацию. Отсутствие мостиковых лигандов и высокая симметрия делает трехъядерные карбонилы Ru и Os удобными опорными соединениями для структурных, спектральных и теоретических исследований.

Тема 9. Металлополиэдры . Электронное строение тетраэдрических и октаэдрических кластерных соединений

практическое занятие (4 часа(ов)):

Металлополиэдры. Октаэдрические и тригонально-призматические кластеры Среди 6-ти ядерных соединений наиболее распространены октаэдрические Соединения, содержащие остов в виде тетрагональной пирамиды (нидо- октаэдра). Кластерные соединения с кубическим, икосаэдрическим остовом. Кластеры технеция с тригонально-призматическим ядром. Реакционная способность соединений, имеющих остов в виде металлополиэдра.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. формирование химии кластеров.	8	1,2	подготовка домашнего задания	4	домашнее задание
2.	Тема 2. Классификация кластерных соединений металлов	8	3,4	подготовка домашнего задания	4	домашнее задание
3.	Тема 3. формирование химии кластеров Как самостоятельного научного направления.	8	5,6	подготовка домашнего задания	4	домашнее задание
4.	Тема 4. Объекты исследования. Некоторые определения.	8	7,8	подготовка домашнего задания	4	домашнее задание
5.	Тема 5. Концепция плотной упаковки лигандов на по-верхности металлического остова.	8	9,10	подготовка к тестированию	4	тестирование
6.	Тема 6. Лиганды в кластерных соединениях. Номенклатура.	8	11,12	подготовка домашнего задания	4	домашнее задание
7.	Тема 7. Электронное строение кластерных соединений.	8	13,14	подготовка домашнего задания	4	домашнее задание
8.	Тема 8. Правило 18 электронов, скелетных электронных пар. Металлоциклы	8	15,16	подготовка домашнего задания	4	домашнее задание
9.	Тема 9. Металлополиэдры . Электронное строение тетраэдрических и октаэдрических кластерных соединений	8	17,18	подготовка к контрольной работе	4	контрольная работа
	Итого				36	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

компьютерные презентации лекций;
круглые столы.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. формирование химии кластеров.

домашнее задание , примерные вопросы:

Возникновение химии кластеров. История развития . Формирование химии кластеров как отдельного раздела химии координационных соединений.

Тема 2. Классификация кластерных соединений металлов

домашнее задание , примерные вопросы:

Связь между ультрадисперсными металлическими частицами и кластерными соединениями металлов.

Тема 3. формирование химии кластеров Как самостоятельного научного направления.

домашнее задание , примерные вопросы:

Лиганды в кластерных соединениях. Химическая связь в металлокластерах.

Тема 4. Объекты исследования. Некоторые определения.

домашнее задание , примерные вопросы:

Типы металлосодержащих химических объектов.

Тема 5. Концепция плотной упаковки лигандов на по-верхности металлического остова.

тестирование , примерные вопросы:

Кластерные соединения имеющие остов в виде металлоцепей. Вопросы к тестированию 1. Какова кратность связи в кластерах молибдена(III)? а) 1, б) 2, в) 3 2. Каково координационное число хрома(II) в биядерном ацетатном кластере? а) 2, б) 4, в) 6, г) 8

Тема 6. Лиганды в кластерных соединениях. Номенклатура.

домашнее задание , примерные вопросы:

Типы лигандов в кластерных соединениях, зависимость числа донируемых электронов от типа координации. Пространственные эффекты лигандов в кластерах. Понятие конического кластерного угла.

Тема 7. Электронное строение кластерных соединений.

домашнее задание , примерные вопросы:

Химическая связь в металлокластерах. Теория молекулярных орбиталей в приложении к кластерным соединениям. Концепция изолабальности. в приложении к кластерным соединениям..

Тема 8. Правило 18 электронов, скелетных электронных пар. Металлоциклы

домашнее задание , примерные вопросы:

Типы металлоциклов.

Тема 9. Металлополиэдры . Электронное строение тетраэдрических и октаэдрических кластерных соединений

контрольная работа , примерные вопросы:

Гигантские кластеры. Контрольная работа. Вопросы к контрольной работе приведены в разделе "Прочее".

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

ВОПРОСЫ К КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЕ

1. Возникновение химии кластеров. История развития .
2. Формирование химии кластеров как отдельного раздела химии координационных соединений.
3. Типы металлосодержащих химических объектов.
4. Связь между ультрадисперсными металлическими частицами и кластерными соединениями металлов.
5. Лиганды в кластерных соединениях.
6. Химическая связь в металлокластерах.
7. Типы металлоостовов удовлетворяющих правилу ЭАН.
8. Кластерные соединения имеющие остов в виде металлоцепей.
9. Типы металлоциклов.
10. Гигантские кластеры.

ПРИМЕРЫ БИЛЕТОВ К ЗАЧЕТУ

Билет ♦1

1. Типы лигандов в кластерных соединениях, зависимость числа донируемых электронов от типа координации.
2. Кратные связи в кластерах Cr(II), Mo(II), Re(III).

Билет ♦2

1. Пространственные эффекты лигандов в кластерах. Понятие конического кластерного угла.
2. Теория молекулярных орбиталей в приложении к кластерным соединениям. Концепция изолабальности. в приложении к кластерным соединениям..

7.1. Основная литература:

1. Ахметов Н.С. Общая и неорганическая химия [Электронный ресурс] : учебник. ? Электрон. дан. ? СПб. : Лань, 2014. ? 744 с. ? Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=50684
2. Гельфман М.И., Юстратов В.П. Неорганическая химия. [Электронный ресурс] - 2-е изд. - Санкт-Петербург: Лань, 2009. - 528 с.
Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=4032
3. Федотов М.А. Ядерный магнитный резонанс в неорганической и координационной химии. Растворы и жидкости [Электронный ресурс]. - М.: Физматлит, 2010. - 384 с.
Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=2151

7.2. Дополнительная литература:

1. Неорганическая химия: в 3 т.: учеб. для студентов вузов, обучающихся по направлению 510500 'Химия' и специальности 011000 'Хими' / [А. А. Дроздов, Ю. Д. Третьяков]; под. ред. Ю. Д. Третьякова. ? Москва: Академия, 2004- Т. 1: Физико-химические основы неорганической химии. ? 2004. ? 233, [1] с.:
2. Неорганическая химия: в 3 т.: учеб. для студентов вузов, обучающихся по направлению 510500 'Химия' и специальности 011000 'Хими' / [А. А. Дроздов, Ю. Д. Третьяков]; под. ред. Ю. Д. Третьякова. ? Москва: Академия, 2004-__ Т. 2: Химия непереходных элементов. ? 2004. ? 365, [1] с.:
3. Введение в физику зарядовых и размерных эффектов : поверхность, кластеры, низкоразмерные системы : учеб. пособие для студентов по спец. 'Прикл. математика и физика' / В.В. Погосов. Москва : Физматлит, 2006. - 328 с.

5. Стойков, И.И. Начала супрамолекулярной химии : учебное пособие / И. И. Стойков ; Казан. гос. ун-т, Научно-образов. центр КГУ 'Материалы и технологии XXI века', Хим. фак. ? Казань : ООО 'РегентЪ', 2001 .? 136 с.

6. Татаринцева Т. Б. Технологии синтеза моно-, биметалльных и металлокомплексных гексацианоферратов: Монография / Т.Б. Татаринцева. - 2-е изд., испр. и перераб. - М.: НИЦ Инфра-М, 2012. - 86 с. Режим доступа: <http://znanium.com/bookread.php?book=366502>

7.3. Интернет-ресурсы:

Кластеры - http://www.chemport.ru/data/chemipedia/article_1670.html

Металлокластеры ? Шапник М.С. - <http://bookre.org/reader?file=813294>

Физико-химия кластеров и наночастиц -

http://www.nanoobr.ru/training/courses/detail.php?ELEMENT_ID=492

Химия кластерных соединений технеция ? Успехи химии -

http://www.uspkhim.ru/php/paper_rus.phtml?journal_id=rc&paper_id=3050

Химия на рубеже веков :свершения и прогнозы -

<http://www.chem.msu.su/rus/publ/Buchachenko/buch3.html>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Кластеры - современный подход в химии координационных соединений" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "КнигаФонд", доступ к которой предоставлен студентам. Электронно-библиотечная система "КнигаФонд" реализует легальное хранение, распространение и защиту цифрового контента учебно-методической литературы для вузов с условием обязательного соблюдения авторских и смежных прав. КнигаФонд обеспечивает широкий законный доступ к необходимым для образовательного процесса изданиям с использованием инновационных технологий и соответствует всем требованиям новых ФГОС ВПО.

Дисциплина обеспечена компьютерами, проекционной техникой, сканером, принтером, печатными изданиями и электронными копиями основных учебников, а также компьютерной программой для моделирования сложных равновесных систем по данным различных экспериментальных методов CPESPP.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 04.03.01 "Химия" и профилю подготовки Неорганическая химия .

Автор(ы):

Чевела В.В. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Амиров Р.Р. _____

"__" _____ 201__ г.