

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»

Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ
Декан химического факультета,
Акад. РАН, профессор



С.Н.Калмыков

«30» августа 2022 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
направленной на подготовку к сдаче кандидатского экзамена по специальности

Неорганическая химия

Inorganic chemistry

Уровень высшего образования:

Программа подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре
Неорганическая химия (104-01-00-141-хн)

Москва 2022

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с Требованиями к основным программам подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре, самостоятельно устанавливаемыми Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова (приказ №1216 от 24 ноября 2021 г.) и паспортом специальности 1.4.1 «Неорганическая химия».

1. Краткая аннотация:

Название дисциплины – Неорганическая химия (*Inorganic chemistry*)

Цель изучения дисциплины – подготовка аспирантов к сдаче кандидатского экзамена по специальности, как высококвалифицированных специалистов, знающих современное состояние неорганической химии, ее роль в современном естествознании и материаловедении, фундаментальные основы методов получения объектов исследования неорганической химии и материалов на их основе, фундаментальные подходы к дизайну и синтезу новых неорганических соединений, методы описания химической связи и строения неорганических соединений, фундаментальные принципы современных экспериментальных методов исследования вещества; умеющих интерпретировать собственные и опубликованные в литературе результаты в области неорганической химии на основе современных представлений о химической связи и реакционной способности неорганических соединений, планировать эксперимент, выбирая наиболее информативные методы исследования для решения конкретных задач, применять современное программное обеспечение для обработки экспериментальных данных и проведения теоретических расчетов, пользоваться базами данных и интернет ресурсами; владеть методами синтеза неорганических соединений с заданными свойствами, современными инструментальными методами исследования состава, строения и свойств неорганических соединений, навыками проведения экспериментов и обработки экспериментальных данных, способами численного моделирования и теоретического прогнозирования реакционной способности неорганических соединений

2. Уровень высшего образования – подготовка кадров высшей квалификации

3. Научная специальность: 1.4.1 Неорганическая химия, область науки: 1. Естественные науки

4. Место дисциплины (модуля) в структуре Программы аспирантуры: Дисциплины (модули), направленные на подготовку к кандидатским экзаменам - курс по специальности. Дисциплина может быть прослушана факультативно.

5. Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетные единицы, всего 108 часов, из которых 80 часов составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (42 часа занятия лекционного типа, 16 часов занятия семинарского типа, 20 часов групповые консультации, 2 часа мероприятия промежуточной аттестации), 28 часов составляет самостоятельная работа обучающегося.

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

На предыдущих уровнях высшего образования должны быть освоены общие курсы:

1. «Математический анализ»,
2. «Неорганическая химия»,
3. «Кристаллохимия»,
4. «Физика»,
5. «Физическая химия»,
6. «Основы квантовой механики»,
7. «Квантовая химия и строение молекул».

7. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы						Самостоятельная работа обучающегося, часы		
		Из них						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 коллоквиумов	Всего
Тема 1. Фундаментальные основы неорганической химии (п.1, 3, 4, 5, 6, 7, 8 Паспорта специальности).	30	12	4	6	-	-	22	8	-	8
Тема 2. Химия элементов-1: s и p элементы (п.2, 3, 5 Паспорта специальности).	28	12	4	6	-	-	22	6	-	6
Тема 3. Химия элементов-2: d и f элементы(п.2, 3, 5 Паспорта специальности).	22	8	4	4	-	-	16	6	-	6
Тема 4. Общие представления о физических методах исследования в неорганической химии (п.5, 6 Паспорта специальности).	26	10	4	4	-	-	18	8	-	8
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>	2	-	-	-	-	2	2	-	-	-
Итого	108	42	16	20		2	80	28		28

Содержание блоков:

Тема 1. Фундаментальные основы неорганической химии

1.1. ПЕРИОДИЧЕСКИЙ ЗАКОН Д.И.МЕНДЕЛЕЕВА И СТРОЕНИЕ АТОМА.

Основные представления о строении атома. Волновая функция и уравнение Шредингера. Квантовые числа, радиальное и угловое распределение

электронной плотности. Атомные орбитали, их энергии и граничные поверхности. Распределение электронов по АО. Современная формулировка периодического закона, закон Мозли, структура Периодической Системы.

Закономерности изменения фундаментальных характеристик атомов: атомных и ионных радиусов, потенциала ионизации, энергии сродства к электрону и электроотрицательности.

Периодичности в изменении свойств простых веществ и основных химических соединений оксидов, гидроксидов, гидридов, галогенидов, сульфидов.

1.2. ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ И СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ.

Понятие о природе химической связи. Основные характеристики химической связи: длина, энергия, направленность, полярность, кратность. Основные типы химической связи.

Основные положения метода валентных связей (МВС). Понятие о гибридизации орбиталей. Направленность, насыщаемость и поляризуемость ковалентной связи. Влияние неподеленных электронных пар на строение молекул, модель Гиллеспи.

Основные положения метода молекулярных орбиталей (ММО). Двухцентровые двухэлектронные молекулярные орбитали. Энергетические диаграммы МО гомоядерных и гетероядерных двухатомных молекул. Энергия ионизации, магнитные и оптические свойства молекул.

Ионная связь. Ионная модель строения кристаллов, образование ионных кристаллов как результат ненаправленности и ненасыщаемости ион-ионных взаимодействий. Ионный радиус. Основные типы кристаллических структур, константа Маделунга, энергия ионной решетки.

Введение в зонную теорию. Образование валентной зоны и зоны проводимости из атомных и молекулярных орбиталей, запрещенная зона.

Металлы и диэлектрики. Границы применимости зонной теории.

1.3. КОМПЛЕКСНЫЕ (КООРДИНАЦИОННЫЕ) СОЕДИНЕНИЯ.

Основные понятия координационной теории. Типы комплексных соединений по классификации лигандов, заряду координационной сферы, числу центральных атомов. Номенклатура комплексных соединений. Изомерия комплексных соединений.

Образование координационных соединений в рамках ионной модели и представлений Льюиса. Теория мягких и жестких кислот и оснований Пирсона. Устойчивость комплексов в растворах и основные факторы, ее определяющие. Константы устойчивости комплексов. Лабильность и инертность.

Природа химической связи в комплексных соединениях. Основные положения теории кристаллического поля (ТКП). Расщепление d орбиталей в октаэдрическом и тетраэдрическом поле. Энергия расщепления, энергия спаривания и энергия стабилизации кристаллическим полем.

Спектрохимический ряд лигандов. Эффект Яна-Теллера 1-го рода, тетрагональное искажение октаэдрических комплексов.

Энергетическая диаграмма МО комплексных соединений. Построение групповых орбиталей и их взаимодействие с орбиталями центрального атома, σ и π -донорные и акцепторные лиганды. Использование ТКП и ММО для объяснения оптических и магнитных свойств комплексных соединений.

Карбонилы, металлокарбены, металлоцены, фуллериды. Комплексы с макроциклическими лигандами. Полиядерные комплексы.

Полиоксометаллаты. Кластеры на основе переходных и непереходных элементов. Кратные связи металл-металл, понятие о δ -связи.

Применение комплексных соединений в химической технологии, катализе, медицине и экологии.

1.4. ОБЩИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ ПРОТЕКАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ.

Основные понятия и задачи химической термодинамики как науки о превращениях энергии при протекании химических реакций.

Термодинамическая система, параметры и функции состояния системы. Первый закон термодинамики. Внутренняя энергия и ее изменение при химических и фазовых превращениях. Энтальпия. Стандартное состояние и стандартные теплоты химических реакций. Теплота и энтальпия

образования.

Обратимые и необратимые процессы. Второй закон термодинамики. Энтропия и ее физический смысл, уравнение Больцмана. Зависимость энтропии от параметров состояния. Энергия Гиббса. Направление химических процессов, критерии самопроизвольного протекания реакций в изолированных и открытых системах. Химический потенциал. Условие химического равновесия, константа равновесия. Фазовые равновесия, число степеней свободы, правило фаз Гиббса. Фазовые диаграммы одно- и двухкомпонентных систем. Скорость химической реакции, ее зависимости от природы и концентрации реагентов, температуры. Порядок реакции.

Константы скорости и ее зависимость от температуры. Энергия активации. Обратимые реакции. Влияние катализатора на скорость реакции. Гомогенный и гетерогенный катализ.

1.5. РАСТВОРЫ И ЭЛЕКТРОЛИТЫ.

Современные представления о природе растворов. Особенности жидких растворов. Порядок в жидкостях, структура воды и водных растворов. Специфика реакций в водных и неводных растворах. Закон Рауля. Осмос.

Теория электролитической диссоциации. Водородный показатель pH. Кислоты и основания. Протолитическая теория Бренстеда Лоури. Сильные и слабые электролиты. Основные понятия теории сильных электролитов Дебая и Хюккеля. Произведение растворимости. Электрохимические свойства растворов. Сопряженные окислительно-восстановительные пары. Электродный потенциал. Окислительно-восстановительные реакции и их направление. Уравнение Нернста. Диаграммы Латимера и Фроста. Электролиз.

1.6. ОСНОВЫ И МЕТОДЫ НЕОРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА.

Прямой синтез соединений из простых веществ. Реакции в газовой фазе, водных и неводных растворах, расплавах. Метод химического осаждения из газовой фазы, использования надкритического состояния. Золь-гель метод. Гидротермальный синтез. Твердофазный синтез и его особенности; способы активации. Химические транспортные реакции. Фотохимические и электрохимические методы синтеза. Методы выращивания монокристаллов и их классификация.

Тема 2. Химия элементов

2.1. ХИМИЯ s-ЭЛЕМЕНТОВ.

Положение s-элементов в Периодической системе, особенности электронной конфигурации. Характерные степени окисления. Водород. Изотопы водорода. Методы получения водорода в лаборатории и промышленности, «зеленый» водород. Физико-химические свойства водорода. Гидриды и их классификация. Окислительно-восстановительные свойства водорода. Вода – строение молекулы и структура жидкого состояния. Структура льда, клатраты. Пероксид водорода, его получение, строение и окислительно-восстановительные свойства.

Элементы 1-й группы. Общая характеристика группы. Основные классы химических соединений – получение и свойства.

Нерастворимые соли. Особенности химии лития. Применение щелочных металлов и их соединений.

Элементы 2-й группы. Общая характеристика группы. Основные классы химических соединений – получение и свойства. Особенности комплексообразования s-металлов. Особенности химии бериллия и магния. Сходство химии бериллия и лития. Применение бериллия, щелочноземельных металлов и их соединений.

2.2. ХИМИЯ p-ЭЛЕМЕНТОВ.

Положение p-элементов в Периодической системе. Характерные степени окисления. Металлы, неметаллы, металлоиды среди p-элементов. Закономерности в изменении свойств во 2 и 3 периодах.

Элементы 13-й группы. Общая характеристика группы. Особенности химии бора. Бороводороды, кластерные соединения бора, правило Уэйда. Комплексные гидробораты, боразол, нитрид бора.

Оксид алюминия. Алуминаты и гидроксоалуминаты. Галогениды алюминия. Комплексные соединения алюминия. Сплавы алюминия. Амфотерность оксидов галлия, индия и таллия. Особенности химии $Tl(I)$. Применение бора, алюминия, галлия, индия, таллия и их соединений.

Элементы 14-й группы. Общая характеристика группы. Особенности химии аллотропных модификаций углерода. Фуллерены и их производные. Нанотрубки. Карбиды металлов. Синильная кислота, цианиды, дициан. Роданостоводородная кислота и роданиды. Сероуглерод. Фреоны и их применение. Оксиды углерода. Карбонилы. Карбонаты.

Оксиды кремния, германия, олова и свинца. Кварц и его полиморфные модификации. Кремниевая кислота и силикаты. Галогениды кремния, кремнефтористоводородная кислота. Карбид кремния. Комплексные соединения олова и свинца. Применение простых веществ и соединений элементов 14-й группы.

Элементы 15-й группы. Общая характеристика группы. Закономерности образования и прочность простых и кратных связей в группе. Особенности химии азота. Проблема связывания молекулярного азота. Особенности аллотропных модификаций фосфора.

Гидриды элементов 15-й группы. Жидкий аммиак как растворитель. Гидразин, гидросиламин, азотистоводородная кислота. Галогениды элементов 15-й группы, получение, свойства, гидролиз.

Кислородные соединения элементов 15-й группы: оксиды, кислоты и их соли. Сравнение свойств кислот в разных степенях окисления. Конденсированные фосфорные кислоты и полифосфаты. Сульфиды и тиосоли.

Применение простых веществ и соединений элементов 15-й группы. Удобрения (NPK).

Элементы 16-й группы. Общая характеристика группы. Особенности химии кислорода. Строение молекулы кислорода, объяснение ее парамагнетизма. Озон и озониды. Аллотропные модификации серы и их строение.

Классификация оксидов. Простые и сложные оксиды, нестехиометрия оксидов. Гидроксиды и кислоты. Пероксиды, супероксиды. Сероводород и сульфиды. Полисульфиды. Сульфаны. Оксиды серы, кислоты и их соли. Политионовые кислоты и политионаты.

Кислородные соединения селена и теллура. Сравнение силы, устойчивости и окислительно-восстановительных свойств кислородных кислот в группе.

Галогениды серы, селена и теллура.

Применение простых веществ и соединений элементов 16-й группы.

Элементы 17-й группы. Общая характеристика группы. Особенности химии фтора и астата. Окислительные свойства галогенов.

Взаимодействие галогенов с водой.

Галогеноводороды. Получение, свойства. Закономерность изменения свойств галогеноводородных кислот в группе.

Межгалогенные соединения: строение и свойства.

Кислородные соединения галогенов. Особенности оксидов хлора. Кислородсодержащие кислоты галогенов и их соли. Сопоставление силы, устойчивости и окислительно-восстановительных свойств кислородных кислот галогенов. Сопоставление силы, устойчивости и окислительно-восстановительных свойств кислородных кислот элементов 3-го периода.

Применение галогенов и их соединений.

Элементы 18-й группы. Общая характеристика группы. Соединения благородных газов и природа химической связи в них. Гидраты благородных газов. Фториды, фторокомплексы и кислородные соединения благородных газов. Применение благородных газов.

Тема 3. Химия элементов-2: d- и f-элементы

ХИМИЯ d-ЭЛЕМЕНТОВ.

Положение d-элементов в Периодической системе. Электронное строение и основные степени окисления. Способность d-элементов к комплексообразованию. Закономерности изменения свойств d-металлов в 4, 5 и 6 периодах. Природа d-сжатия и ее следствия.

Элементы 3-й группы. Общая характеристика группы. Оксиды, гидроксиды и фториды – получение и свойства. Комплексные соединения. Особенности химии скандия. Применение металлов и их соединений.

Элементы 4-й группы. Общая характеристика группы. Оксиды, гидроксиды и оксопроизводные. Галогениды. Способность металлов 4-й группы к комплексообразованию. Закономерности в стабильности различных степеней окисления. Влияние лантаноидного сжатия на свойства гафния. Применение титана и циркония и их соединений.

Элементы 5-й группы. Общая характеристика группы. Оксиды и галогениды. Ванадаты, ниобаты и танталаты. Способность к комплексообразованию и образованию кластеров. Закономерности в стабильности различных степеней окисления. Сопоставление свойств соединений ванадия (V) и фосфора (V). Применение ванадия, ниобия, тантала и их соединений.

Элементы 6-й группы. Общая характеристика группы. Оксиды, галогениды и сульфиды. Сравнение свойств хромовой, молибденовой и вольфрамовой кислот и их солей. Особенности комплексообразования. Кластеры. Бронзы. Полиоксокислоты и их соли. Пероксиды. Окислительно-восстановительные свойства соединений хрома, закономерности в стабильности различных степеней окисления. Применение хрома, молибдена и вольфрама и их соединений.

Элементы 7-й группы. Общая характеристика группы. Кислородные соединения марганца, их кислотно-основные и окислительно-восстановительные свойства. Стабильность соединений марганца в различных степенях окисления. Особенности химии технеция и рения. Кластеры рения. Рениевая кислота и перренаты. Применение марганца, технеция и рения.

Элементы 8-й, 9-й и 10-й групп. Общая характеристика групп. Обоснование разделения элементов на семейство железа и платиновые металлы, ограничения подхода.

Семейство железа: методы получения и физико-химические свойства железа, кобальта и никеля. Оксиды и гидроксиды, галогениды и сульфиды. Комплексные соединения, особенности комплексов с d⁶ конфигурацией центрального атома. Коррозия железа и борьба с ней. Применение железа, кобальта и никеля.

Платиновые металлы: Основные классы комплексных соединений платиновых металлов. Оксиды и галогениды платиновых соединений. Разделение платиновых металлов и их применение.

Элементы 11-й группы. Общая характеристика группы. Оксиды и гидроксиды, медь-кислородные ВТСП. Галогениды и галогенидные комплексы. Сульфиды. Изменение в устойчивости степеней окисления элементов в группе. Комплексные соединения. Применение меди, серебра и золота.

Элементы 12-й группы. Общая характеристика группы. Особенности подгруппы цинка в качестве промежуточной между переходными и непереходными металлами. Оксиды, гидроксиды, галогениды и сульфиды. Амальгамы. Особенности соединений ртути в степени окисления +1. Способность к комплексообразованию и основные типы комплексов цинка, кадмия и ртути. Применение цинка, кадмия и ртути.

3.1. ХИМИЯ f-ЭЛЕМЕНТОВ.

Общая характеристика f-элементов. Особенности строения электронных оболочек атомов. Лантанидное и актиноидное сжатие.

Сходство и различие лантанидов и актиноидов.

Семейство лантанидов. Методы получения, разделения и физико-химические свойства металлов. Степени окисления элементов и закономерности их изменения в ряду. Основные классы химических соединений получение и свойства. Комплексные соединения лантанидов. Особенности химии

церия и европия. Сопоставление d и f-элементов 3 группы. Применение лантаноидов.

Семейство актиноидов. Обоснование актиноидной теории. Методы получения и физико-химические свойства актиноидов. Особенности разделения актиноидов. Степени окисления актиноидов и закономерности их изменения в ряду. Основные классы химических соединений актиноидов – получение и свойства. Комплексные соединения актиноидов. Особенности химии тория и урана. Сопоставление актиноидов с d-элементами 6-го периода. Применение актиноидов и их соединений.

Тема 4. Общие представления о физических методах исследования в неорганической химии

Дифракционные методы исследования: рентгенофазовый и рентгеноструктурный анализы, нейтронография, электронография. Применение синхротронного излучения. Спектральные методы исследования: электронные спектры в видимой и УФ-области. Колебательная спектроскопия – ИК и комбинационного рассеяния, люминесценция. Спектроскопия ЭПР, ЯМР, ЯКР и γ – резонансная. EXAFS-спектроскопия. Спектроскопия циркулярного (кругового) дихроизма. Мессбауэровская спектроскопия. Исследования электропроводности и магнитной восприимчивости. Исследования дипольных моментов. Импеданс-спектроскопия. Оптическая и электронная микроскопия. Просвечивающая и растровая микроскопия, основные области применения. Локальный рентгеноспектральный анализ. Термический анализ. Термогравиметрия и масс-спектрометрия. Исследование поверхности методами рентгено и фотоэлектронной спектроскопии, оже-спектроскопии. Теоретическое исследование неорганических соединений при помощи методов квантовой химии. Основы подходов к описанию электронного строения неорганических соединений. Предсказание свойств.

8. Образовательные технологии.

Проводятся традиционные лекции с использованием мультимедийных презентаций.

9. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю): Аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и перечень заданий для самостоятельной работы. По теме каждой лекции указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы, а также из интернет-ресурсов.

10. Ресурсное обеспечение:

Основная литература

1. Третьяков Ю.Д., Мартыненко Л.И., Григорьев А.Н., Цивадзе А.Ю. Неорганическая химия. 2-е издание, переработанное и дополненное М.: Академкнига, 2007. т. 1, 2.
2. Ахметов Н.С. Общая и неорганическая химия. 3е изд. М.: Высш. шк. 1998.
3. Хьюи Дж. Неорганическая химия: строение вещества и реакционная способность. М.: Химия. 1987.
4. Д. Шрайвер, П. Эткинс. Неорганическая химия. В 2 томах. М.: Мир, 2004.
5. Н. Гринвуд, А. Эрншо. Химия элементов. В 2 томах. М.: Бином, 2008.
6. А.В. Шевельков, А.А. Дроздов, М.Е. Тамм. Неорганическая химия. М.: Лаборатория знаний. 2021.
7. Коттон Ф., Уилкинсон Дж. Современная неорганическая химия. М.: Мир. 1969. т. 1–3.

Дополнительная литература

1. Вест А. Химия твердого тела. Теория и приложения. В 2 частях. М.: Мир, 1988.
2. Гиллеспи Р, Харгиттаи И. Модель отталкивания электронных пар валентной оболочки и строение молекул. М.: Мир. 1992.
3. 3. Джонсон Д. Термодинамические аспекты неорганической химии. М.: Мир. 1985.
4. Карапетьянц М.Х., Дракин С.И. Общая и неорганическая химия. М.: Химия. 2001.
5. И.Б. Берсукер, Строение и свойства координационных соединений (введение в теорию). Л., Химия, 1971.
6. Драго А. Физические методы в химии. М.: Мир. 1981. т. 1, 2.
7. Н.А.Костромина, В.Н.Кумок, Н.А.Скорик. Химия координационных соединений. М.: Высш. шк. 1990.
8. Кукушкин Ю.Н. Химия координационных соединений. М.: Высш. шк. 2001.
9. В.В. Скопенко, А.Ю. Цивадзе, Л.И. Савранский, А.Д. Гарновский. Координационная химия. М.: Академкнига, 2007.
10. Полторац О.И., Ковба Л.М. Физико-химические основы неорганической химии. М.: Изд. Моск. ун-та. 1984.
11. Турова Н.Я. Неорганическая химия в таблицах. М.: ВХК РАН. 1999.
12. Уэллс А. Структурная неорганическая химия. М.: Мир. 1987. т. 1–3
13. Суворов А.В., Никольский А.Б. Общая химия. М.: Мир. 1997.

Журналы

«Успехи химии», «Журнал неорганической химии», «Неорганические материалы», «Кристаллография», «Известия РАН. Серия химическая», «Доклады Академии наук. Серия химия», «Журнал структурной химии», «Координационная химия», Materials Chemistry, Mendeleev Communications, Scientific Reports, Journal of Materials Chemistry, Journal of Alloys and Compounds, Inorganic Chemistry, European Journal of Inorganic Chemistry, Chemistry A European Journal, Journal of Crystal Growth.

Перечень используемых информационных технологий

- Международный союз кристаллографии: www.iucr.org
- Сайт разработчиков программы PLATON: www.cryst.chem.uu.nl/spek/platon
- Сайт разработчиков программ SHELX: shelx.uni-ac.gwdg.de/SHELX
- Кембриджская база структурных данных: www.ccdc.cam.ac.uk
- Сайт разработки системы CALPHAD: www.calphad.org
- Сайт международного сообщества по вычислительной термодинамике: www.opencalphad.com
- Доступ к различным базам данных по материаловедению: materials.springer.com
- Сайт разработки и распространения программы Thermo-Calc: www.thermocalc.com
- База данных ИВТАНТЕРМО: www.ihed.ras.ru
- Справочные системы: NISTChemistryWebbook (<http://webbook.nist.gov/chemistry/>), БД «Термические константы веществ» (<http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl?show=welcome.html/welcome.html>)
- Справочные системы: NISTChemistryWebbook (<http://webbook.nist.gov/chemistry/>) БД «Термические константы веществ» (<http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl?show=welcome.html/welcome.html>)

Описание материально-технической базы

Занятия проводятся в аудитории, оснащенной доской и оборудованием для демонстрации презентации. Вспомогательный материал в виде презентации доступен аспирантам на сайтах

1. http://www.inorg.chem.msu.ru/index_r.php?topic=asp
2. http://www.inorg.chem.msu.ru/index_r.php?topic=col
3. <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/general-spec.html>

11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватели:

- д.х.н., профессор Дунаев Сергей Федорович, dunaev@general.chem.msu.ru
- д.х.н., доцент Клямкин Семен Нисонович, klyamkin@highp.chem.msu.ru
- д.ф.-м.н., доцент Ионов Сергей Геннадьевич, ionov@highp.chem.msu.ru
- д.х.н., в.н.с. Кузнецов Алексей Николаевич, alexei@inorg.chem.msu.ru

**Фонды оценочных средств,
необходимые для оценки результатов обучения**

Образцы домашних заданий:

Задание 1.

Предложите группу неорганических соединений, состав и строение которых определяют наличие полупроводниковых свойств. Укажите, какие именно аспекты строения отвечают за полупроводниковые свойства. Предложите методы синтеза материалов на основе этих соединений в форме монокристаллов или керамики. Предложите методы определения фазового состава, химического состава, кристаллической структуры, функциональных свойств.

Задание 2.

Опишите строение и свойства комплексов 4d и 5d-элементов с применением теории кристаллического поля и метода молекулярных орбиталей. Проследите взаимосвязь между электронным строением комплексов, их термодинамической и кинетической устойчивостью, оптическими и магнитными свойствами.

Задание 3.

Обсудите общие характеристики элементов главной и побочной подгрупп выбранной Вами группы Периодической системы. Обоснуйте наблюдаемые основные тенденции в изменении свойств элементов, физических и химических свойств простых веществ, характерных степеней окисления, основные типы соединений, координационные числа и типичные комплексы.

Примерные темы рефератов:

1. Применение мессбауэровской спектроскопии для исследования оксидов переходных металлов
2. Гидротермальный синтез функциональных материалов
3. Квантово-химические исследования углеродных наноструктур
4. Нанотермодинамика
5. Методы описания фазовых равновесий в процессе жидкофазной экстракции.
6. Методы синтеза плоских (2D) наночастиц полупроводниковых материалов
7. Повышение жаростойкости сплавов методом избирательного легирования
8. Переменная (осциллирующая) валентность церия в интерметаллических соединениях

Примерные темы устных докладов на научном семинаре:

1. Современные люминесцирующие материалы для клеточной биовизуализации
2. Магнитные наночастицы и коллоидные растворы на их основе
3. Ионные жидкости. Основные свойства и применения.
4. Легирование коллоидных квантовых точек ионами переходных и редкоземельных элементов.
5. Создание планарных структур на основе наночастиц благородных металлов для аналитических целей.
6. Металлические сплавы с тяжелофермионными свойствами
7. Образование оксидных наноструктур на поверхности электродов в электрокаталитических реакциях

Вопросы к зачету:

Тема 1

1. Понятие о природе химической связи. Основные характеристики химической связи. Типы химической связи. Основные положения метода валентных связей (МВС). Понятие о гибридизации орбиталей. Ковалентная связь. Влияние неподеленных электронных пар на строение молекул, модель Гиллеспи.
2. Основные положения метода молекулярных орбиталей (ММО). Двухцентровые двухэлектронные молекулярные орбитали. Энергетические диаграммы МО гомоядерных и гетероядерных двухатомных молекул. Энергия ионизации и магнитные свойства молекул.
3. Ионная связь. Ионная модель строения кристаллов. Ионный радиус. Основные типы кристаллических структур, константа Маделунга, энергия ионной решетки. Межмолекулярное взаимодействие – ориентационное, индукционное и дисперсионное. Водородная связь, ее природа.
4. Основные понятия координационной теории. Типы комплексных соединений по классификации лигандов, заряду координационной сферы, числу центральных атомов. Номенклатура комплексных соединений. Изомерия комплексных соединений.
5. Природа химической связи в комплексных соединениях. Основные положения теории кристаллического поля (ТКП). Расщепление d-орбиталей в октаэдрическом и тетраэдрическом поле лигандов. Энергия расщепления, энергия спаривания и энергия стабилизации кристаллическим полем. Спектрохимический ряд лигандов.
6. Термодинамика наносистем. Современные представления о природе растворов. Особенности жидких растворов. Порядок в жидкостях, структура воды и водных растворов. Специфика реакций в водных и неводных растворах. Золь-гель метод.
7. Введение в зонную теорию. Образование зон – валентной и проводимости из атомных и молекулярных орбиталей, запрещенная зона. Металлы и диэлектрики. Границы применимости зонной теории.
8. Механизмы реакций комплексных соединений. Реакции замещения, отщепления и присоединения лиганда, окислительно-восстановительные реакции. Взаимное влияние лигандов в координационной сфере. Транс-влияние И.И. Черняева, цис-эффект А.А. Гринберга. Внутрисферные реакции лигандов.
9. Основные методы разделения и очистки веществ. Методы выращивания монокристаллов и их классификация. Метод химического осаждения из газовой фазы, использования надкритического состояния. Применение вакуума и высоких давлений в синтезе.

Темы 2-3

1. Элементы 8-10 групп. Общая характеристика групп. Получение и физикохимические свойства железа, кобальта и никеля. Оксиды и гидроксиды, галогениды и сульфиды. Соединения железа, кобальта и никеля в высших степенях окисления. Комплексные соединения, особенности комплексов с d⁶ конфигурацией центрального атома. Применение железа, кобальта и никеля.
2. Элементы группы 11. Общая характеристика группы. Оксиды, гидроксиды и галогениды. Изменение устойчивости степеней окисления элементов в группе. Комплексные соединения. Сопоставление элементов 1 и 11 групп. Применение меди, серебра и золота.
3. Элементы группы 7. Общая характеристика группы. Кислородные соединения марганца, их кислотно-основные и окислительно-восстановительные свойства, диаграмма Фроста для соединений марганца. Стабильность соединений марганца в различных степенях окисления. Особенности химии технеция и рения. Рениевая кислота и перренаты. Сопоставление химии элементов 7 и 17 групп. Применение марганца и рения.
4. Общая характеристика f-элементов. Особенности строения электронных оболочек атомов. Лантаноидное и актиноидное сжатие. Сходство и различие лантаноидов и актиноидов. Внутренняя периодичность в семействах лантаноидов и актиноидов.
5. Элементы группы 12. Общая характеристика группы. Особенности подгруппы цинка в качестве промежуточной между переходными и непереходными металлами. Оксиды,

гидроксиды, галогениды и сульфиды. Амальгамы. Особенности соединений ртути в степени окисления +1. Способность к комплексообразованию и основные типы комплексов цинка, кадмия и ртути. Сопоставление элементов 2 и 12 групп. Применение цинка, кадмия и ртути.

6. Элементы группы 6. Общая характеристика группы. Окислительно-восстановительные свойства соединений хрома, закономерности в стабильности различных степеней окисления. Сопоставление химии элементов 6 и 16 групп. Применение хрома, молибдена и вольфрама и их соединений.

7. Водород. Особое положение водорода в Периодической системе. Изотопы водорода. Орто и пара-водород. Методы получения водорода. Гидриды и их классификация. Окислительно-восстановительные свойства водорода. Вода – строение молекулы и структура жидкого состояния. Структура льда, клатраты. Пероксид водорода, его получение, строение и окислительно-восстановительные свойства.

8. Элементы группы 2. Общая характеристика группы. Основные классы химических соединений – получение и свойства. Особенности комплексообразования металлов. Особенности химии бериллия, магния и радия. Сходство химии бериллия и алюминия. Применение бериллия, щелочно-земельных металлов и их соединений.

9. Элементы группы 13. Общая характеристика группы. Особенности химии бора. Бороводороды, комплексные гидробораты, кластерные соединения бора, боразол, нитрид бора: особенности их строения и свойств. Оксид алюминия. Алуминаты и гидроксоалуминаты. Галогениды алюминия. Комплексные соединения алюминия. Сплавы алюминия. Алюмотермия. Амфотерность оксидов галлия, индия и таллия. Особенности химии $Tl(I)$. Применение бора, алюминия, галлия, индия и таллия и их соединений.

10. Элементы группы 14. Общая характеристика группы. Особенности химии аллотропных модификаций углерода. Фуллерены и их производные. Нанотрубки. Карбиды металлов. Синильная кислота, цианиды, дициан. Роданистоводородная кислота и роданиды. Сероуглерод. Фреоны и их применение. Оксиды углерода. Карбонилы. Карбонаты. Оксиды кремния, германия, олова и свинца. Кварц и его полиморфные модификации. Кремниевая кислота и силикаты. Галогениды. Кремнефтористоводородная кислота. Карбид кремния. Комплексные соединения олова и свинца. Применение простых веществ и соединений элементов группы 14.

11. Элементы группы 15. Общая характеристика группы. Закономерности образования и прочность простых и кратных связей в группе. Особенности химии азота. Проблема связывания молекулярного азота. Особенности аллотропных модификаций фосфора. Кислородные соединения азота. Особенности химии NO и NO_2 . Азотная, азотистая кислоты и их соли: получение, свойства и окислительно-восстановительная способность. Гидриды элементов группы 15: получение, строение молекул, свойства. Соли аммония. Жидкий аммиак как растворитель. Гидразин, гидросиламин, азотистоводородная кислота. Галогениды элементов группы 15, получение и гидролиз.

12. Положение d-элементов в Периодической системе. Электронное строение и основные степени окисления. Способность d-элементов к комплексообразованию. Закономерности изменения свойств d-металлов в 4, 5 и 6 периодах. Природа dсжатия и ее следствия.

13. Элементы группы 15. Общая характеристика группы. Кислородные соединения фосфора: оксиды, кислоты и их соли. Сравнение свойств кислот фосфора в разных степенях окисления. Конденсированные фосфорные кислоты и полифосфаты. Оксиды мышьяка, сурьмы и висмута, кислородсодержащие кислоты мышьяка и сурьмы и их соли. Сравнение силы кислот в группе. Сульфиды и тиосоли.

14. Получение и физико-химические свойства железа, кобальта и никеля. Оксиды и гидроксиды, галогениды и сульфиды. Соединения железа, кобальта и никеля в высших степенях окисления. Коррозия железа и борьба с ней. Применение железа, кобальта и никеля.

15. Общая характеристика группы. Особенности химии кислорода. Строение молекулы кислорода, объяснение ее парамагнетизма. Озон и озониды. Аллотропные модификации серы

и их строение. Классификация оксидов. Простые и сложные оксиды, нестехиометрия оксидов. Гидроксиды и кислоты. Пероксиды, супероксиды.

16. Сероводород и сульфиды. Полисульфиды. Сульфаны. Оксиды серы, кислоты и их соли. Политионовые кислоты и политионаты. Кислородные соединения селена и теллура. Сравнение силы, устойчивости и окислительно-восстановительных свойств кислородных кислот в группе. Галогениды серы, селена и теллура.

17. Элементы группы 17. Общая характеристика группы Галогеноводороды. Получение, свойства. Закономерность изменения свойств галогеноводородных кислот в группе. Классификация галогенидов. Межгалогенные соединения: строение и свойства.

Тема 4

1. Методы исследования неорганических веществ, основанные на применении рентгеновского излучения: дифракционные и спектральные.

2. Дифракционные методы, не использующие рентгеновское излучение.

3. Спектральные методы исследования: электронные спектры в видимой и УФобласти. EXAFS-спектроскопия. Спектроскопия циркулярного (кругового) дихроизма. Мессбауэровская спектроскопия.

4. Колебательная спектроскопия – ИК и комбинационного рассеяния, люминесценция. Спектроскопия ЭПР, ЯМР, ЯКР и γ – резонансная.

5. Исследования транспортных свойств. Исследования дипольных моментов. Импеданс-спектроскопия.

6. Исследования магнитных свойств.

7. Оптическая и электронная микроскопия. Просвечивающая и растровая микроскопия, основные области применения. Локальный рентгеноспектральный анализ.

8. Термический анализ. Термогравиметрия и масс-спектрометрия.

9. Методы исследования поверхности.

10. Теоретическое исследование неорганических соединений при помощи методов квантовой химии. Основы подходов к описанию электронного строения неорганических соединений. Информация, извлекаемая из расчетных данных.

**Методические материалы
для проведения процедур оценивания результатов обучения**

Зачет проходит по билетам, каждый из которых включает два теоретических вопроса: один по темам 1 и 4, второй по темам 2 и 3. Уровень знаний аспиранта по каждому вопросу оценивается на «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». В случае, если на все вопросы был дан ответ, оцененный не ниже, чем «удовлетворительно», аспирант получает общую оценку «зачтено» и допускается к сдаче кандидатского экзамена.

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка Результат	Незачёт (2)	Зачёт (3)	Зачёт (4)	Зачёт (5)
Знания	Отсутствие базовых знаний о современных концепциях и законах неорганической химии	Общие, но неглубокие знания о современных концепциях и законах неорганической химии, содержащие пробелы	Общие, но не структурированные знания о современных концепциях и законах неорганической химии	Сформированные систематические знания о современных концепциях и законах неорганической химии
Умения	Отсутствие умения применять знания о современном состоянии неорганической химии для решения научных задач	В целом успешное, но не систематическое умение применять знания о современном состоянии неорганической химии для решения научных задач	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение применять знания о современном состоянии неорганической химии для решения научных задач (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение применять знания о современном состоянии неорганической химии для решения научных задач
Навыки (владения)	Отсутствие навыков прогнозирования путей неорганического синтеза	Наличие навыков прогнозирования путей неорганического синтеза, не всегда верно используемых	В целом сформированные навыки прогнозирования путей неорганического синтеза, но не в активной форме	Сформированные навыки прогнозирования путей неорганического синтеза, применяемые при решении задач