

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ЗАГАЛЬНОЇ ТА НЕОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ ім.В.І.ВЕРНАДСЬКОГО

ЗАТВЕРДЖЕНО
Вченою радою Інституту загальної та неорганічної хімії
ім. В.І. Вернадського НАН України
протокол № 9
від « 4 » травня 2024 року

Голова Вченої ради Інституту



Сергій СОЛОПАН

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ (СИЛАБУС)

Координаційна хімія

(назва навчальної дисципліни)

Рівень вищої освіти: **Третій (освітньо-науковий)**

Галузь знань: **10 Природничі науки**

Спеціальність: **102 Хімія**

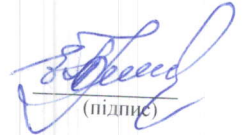
Освітньо- наукова програма: **Неорганічна і координація хімія, фізична хімія, електрохімія**

Київ
2024

Робоча програма навчальної дисципліни «Координаційна хімія» - Київ, 2024. – 10 с.

РОЗРОБНИКИ РОБОЧОЇ ПРОГРАМИ:

Завідувач відділу гетерофазного синтезу неорганічних сполук та матеріалів ІЗНХ ім. В.І. Вернадського НАН України,
доктор хімічних наук, старший науковий співробітник
Олена ТРУНОВА


(підпис)

Погоджено із гарантом ОНП



Анатолій ОМЕЛЬЧУК

Програму затверджено на засіданні Вченої ради
Інституту загальної та неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського НАН України
протокол № 9
від «4» жовтня 2024 року

Вчений секретар Інституту



Людмила ЛИСЮК

1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Характеристика дисципліни
Загальна кількість: кредитів – 1 годин – 30 змістових модулів – 2	<i>Обов'язкова дисципліна</i>
	<i>Рік підготовки – 2 курс</i>
	<i>Лекції - 8 год</i>
	<i>Практичні - 6 год</i>
	<i>Консультації - 2 год</i>
	<i>Самостійна робота 1 год</i>
	<i>Форма підсумкового контролю: іспит</i>

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Мета: сформувати знання основних питань важливої галузі сучасної хімії, яка знаходиться на стику неорганічної та органічної хімії – координаційної хімії.

Завдання: : ознайомлення аспірантів з основними методами синтезу та властивостями координаційних сполук, розповсюдженням, будовою, хімічними властивостями біометалів та їх комплексних сполук з біолігандами. Визначення основних хімічних, біохімічних та фізіологічних властивостей координаційних сполук. Ознайомлення з медико-біологічними можливостями комплексонів та комплексонатів металів. Прогнозування імовірності взаємодії біометалу-комплексоутворювача з окремими електронодонорними групами біолігандів для моделювання координаційних сполук з метою їх використання в медицині, фармації та сільському господарстві. Для кращого засвоєння навчальної дисципліни на заняттях рекомендується використовувати сучасні навчально-контролюючі комп'ютерні технології, навчальний і контролюючий дидактичний матеріал.

Предмет дисципліни: включає основні характерні для науково-дослідної роботи положень, розглядає основні поняття хімії координаційних сполук, їх будову, властивості, методи одержання та перспективи практичного застосування.

Процес вивчення дисципліни спрямований на формування елементів наступних **компетентностей:**

а) загальних (ЗК):

ЗК1, ЗК3, ЗК4, ЗК5, ЗК8

б) спеціальних/фахових (СК/ФК):

СК1, СК3, СК4, СК7

Програмні результати навчання (ПРН): ПРН 2, ПРН 3, ПРН 4, ПРН 6, ПРН 14, ПРН 15, ПРН 16, ПРН 20.

У результаті вивчення навчальної дисципліни здобувач вищої освіти повинен **знати:**

- загальні поняття хімії координаційних сполук, їх сучасну номенклатуру;
- теорії координаційного зв'язку;

- основні типи координаційних сполук;
- основні типи хімічного зв'язку;
- загальні методи синтезу, в тому числі, направлений синтез координаційної сполуки;

вміти:

- володіти концепціями сучасної хімії координаційних сполук;
- розв'язувати конкретні задачі синтезу, в тому числі, направленої отримання координаційних сполук певного складу та будови;
- використовувати сучасні методи - теорії груп, фізико-хімічні методи, для дослідження будови та структури комплексів;
- інтерпретувати результати власного дослідження, співставляючи їх з літературними даними, виділяючи основні переваги та недоліки.

Міждисциплінарні зв'язки.

Для здобуття та узагальнення знань з координаційної хімії, формування наукового мислення, розуміння та інтерпретації наукових результатів необхідна початкова фундаментальна база, тобто знання спеціальних хімічних дисциплін, а саме: загальної, неорганічної, фізичної хімії, хімії твердого тіла, сучасних фізико-хімічних методів аналізу.

3. Зміст навчальної дисципліни

Змістовий модуль 1. ОСНОВИ КООРДИНАЦІЙНОЇ ХІМІЇ

Тема 1. Вступ. Основи координаційної теорії. Передісторія вчення про координаційні сполуки. Історія розвитку поглядів на утворення “сполук вищого порядку”. Основні етапи розвитку координаційної хімії. Основні положення теорії Вернера. Основні поняття хімії координаційних сполук (центральный атом, ліганди, донорний атом, дентантність, координаційна сфера, координаційне число, ступінь окиснення центрального іона, ковалентність центрального іона і ін.). Класифікація координаційних сполук (за природою лігандів, за типом комплексів, хелати, комплексонати та комплекси з макроциклічними лігандами та ін.). Класифікація координаційних сполук за зарядом координаційної сфери та ядерності (молекулярні, катіонні, аніонні, катіон-аніонні сполуки). Поліядерні комплекси. Клатрати та сполуки включення. Кластери. Різнолігандні комплекси. Сучасні уявлення про координацію. Комплексні іони та нейтральні комплекси. Подвійні та комплексні солі. Уявлення про інертні та лабільні комплекси.

Тема 2. Основні типи координаційних сполук. Номенклатура координаційних сполук. Ізомерія координаційних сполук. Види ізомерії. Геометрична та оптична ізомерія. Сольватна (гідратна) ізомерія. Ізомерія зв'язку. Іонізаційна ізомерія. Структурна ізомерія. Просторова інтерпретація координаційних чисел. Основні ліганди координаційних сполук. Класифікація КС за типом лігандів та структурним принципом.

Тема 3. Методи синтезу координаційних сполук.

Основні принципи синтезу. Рівноважні методи синтезу та механізми реакцій заміщення лігандів. Метод іонного обміну. Екстракція. Реакції окиснення -

відновлення. Темплатний синтез. Електрохімічний синтез та прямий синтез. Фотохімічний синтез.

Вплив центрального іону та лігандів на реакції комплексоутворення. Емпіричні правила взаємного впливу лігандів (Правило Пейроне, Правило розщеплення Йоргенсена). Взаємний вплив координованих груп. Закономірність транс-впливу І.І. Черняєва. Цис - вплив. Теорія π -зв'язку Чатта-Оргелла. Теорія Таубе.

Залежність комплексоутворюючих властивостей від природи центрального іона та лігандів. Принцип Пірсона. Хелатний ефект. Правило циклів Л.А. Чугаєва.

Тема 4. Стійкість комплексів в розчинах. Визначення констант стійкості комплексних сполук в розчинах. Константа рівноваги утворення комплексу. Методи розрахунку констант рівноваги. Потенціометричне визначення констант рівноваги. Методи, пов'язані з вивченням гетерогенних рівноваг. Методи, пов'язані з вивченням адитивних функцій складу розчину. Фактори, що впливають на стійкість комплексів в розчинах. Вплив геометричних факторів, некоординованих замісників. Правила Келвіна-Мелхіора, Ірвінга-Уільямса. Фактори впливу на стійкість комплексів.

Тема 5. Термодинаміка комплексоутворення. Термодинамічні характеристики процесу комплексоутворення: ентропія, ентальпія, енергія Гіббса комплексоутворення, середня енергія координаційного зв'язку, середня енергія координаційного зв'язку в розчині.

Тема 6. Природа хімічного зв'язку в координаційних сполуках.

Електростатичні уявлення. Поляризація іонів. Теорія жорстких та м'яких кислот та основ і її використання для пояснення властивостей комплексних сполук. Метод валентних зв'язків. Тип гібридизації орбіталей центрального атома та просторові конфігурації КС. Донорно-акцепторний зв'язок в КС. Механізм утворення дативних зв'язків. Взаємний вплив дативних і донорно-акцепторних σ -зв'язків. Гібридизація АО. Геометричні форми комплексів залежно від типу гібридизації АО центрального іона.

Тема 7. Теорія кристалічного поля. Загальні положення. Розщеплення d- і f-підрівнів в полях різної симетрії з точки зору теорії кристалічного поля. Параметр розщеплення. Терми. Слабке та сильне поле. Низько- і високоспінові комплекси. Спектрохімічний ряд лігандів. Енергія стабілізації кристалічним полем. Магнітні та оптичні властивості КС в залежності від типу лігандів, ЦА та координаційного поліедру. Розщеплення d-підрівня в полях різної симетрії. Теорема Яна-Телера. Теорія поля лігандів. Ковалентний зв'язок. Нефелоксетичний ряд лігандів. Використання уявлень про будову координаційних сполук для пояснення їх окисно-відновних властивостей, стабілізації "незвичайних" ступенів окислення, стійкості, розчинності, леткості, тощо.

Тема 8. Метод молекулярних орбіталей. Загальні положення. Адіабатичне і одноелектронне наближення в методі МО. Метод МО-ЛКАО для координаційних сполук (теорія Джелеспі). Лінійні комбінації орбіталей іона металу і лігандів для комплексів різної симетрії. Схема МО. Заселеність МО і ефективний заряд за Маллікеном.

Змістовий модуль 2. ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ТА МЕТОДИ АНАЛІЗУ КООРДИНАЦІЙНИХ СПОЛУК.

Тема 1. Огляд методів дослідження будови координаційних сполук.

Шкала електромагнітних хвиль. Спектроскопія Месбауера. Дифракційні методи вивчення структури: рентгенографазовий та рентгеноструктурний аналіз, електронографія та нейтронографія, спектроскопія EXAFS. Рентгеноелектронна та фотоелектронна спектроскопія, Оже спектроскопія.

Електронна спектроскопія. рН-потенціометрія. Оптичні властивості комплексів: вплив центрального атома на забарвлення хелатів, хромофорні та ауксохромні групи лігандів, флуоресценція. Застосування електронних спектрів для виявлення характеру зв'язку центральний атом-ліганд.

Коливальна (ІЧ та КР) спектроскопія. Її застосування для встановлення природи зв'язку в координаційній сфері та способу координації лігандів. Методи радіоспектроскопії (ЕПР та ЯМР), можливості та обмеження їх використання для вивчення координаційних сполук.

Електрохімічні властивості комплексних сполук, метод циклічної вольтамперометрії. Електронна мікроскопія.

Тема 2. Практичне значення координаційних сполук.

Застосування координаційних сполук в аналітичній хімії: в гравіметрії (порівняння неорганічних і органічних осаджувачів), в титриметрії, спектрофотометрії, флуоресценції. Маскування. Використання різнолігандних комплексів. Екстракція. Сорбційне концентрування.

Координаційні сполуки в технології рідкісних та кольорових металів, біології, медицині та сільському господарстві. Металокомплексний каталіз.

Координаційна хімія – розділ хімії, що вивчає координаційні (комплексні) сполуки, тобто хімічні сполуки, що складаються з центрального атома, іона і пов'язаних з ним молекул або іонів (лігандів). Координаційна хімія вивчає методи синтезу та будову комплексних сполук, їхні фізико-хімічні властивості, реакційну здатність, природу хімічного зв'язку, особливості перебігу реакцій комплексоутворення тощо.

4. Теми лекційних занять

№, з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Розвиток ідей у координаційній хімії: від теорії Вернера до сучасних уявлень	2
2	Структура, ізомерія та номенклатура координаційних сполук	2
3	Методи дослідження будови координаційних сполук	2
4	Практичне значення координаційних сполук	2

5. Теми семінарських занять

Семінарські завдання не передбачені

6. Теми практичних занять

№, з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Синтез та реакції у координаційній хімії	2
2	Термодинамічні характеристики та стійкість координаційних сполук	1
3	Експериментальні методи дослідження координаційних сполук	1

7. Теми лабораторних занять

Лабораторні заняття не передбачені.

8. Самостійна робота

№, з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Основи координаційної теорії. Передісторія вчення про координаційні сполуки. Історія розвитку поглядів на утворення “сполук вищого порядку”. Основні етапи розвитку координаційної хімії. Основні поняття хімії координаційних сполук. Класифікація координаційних сполук. Поліядерні комплекси. Клатрати та сполуки включення. Кластери. Різнолігандні комплекси. Сучасні уявлення про координацію. Комплексні іони та нейтральні комплекси. Подвійні та комплексні солі. Уявлення про інертні та лабільні комплекси.	4
2	Основні типи координаційних сполук. Номенклатура координаційних сполук. Ізомерія координаційних сполук. Види ізомерії. Геометрична та оптична ізомерія. Сольватна (гідратна) ізомерія. Ізомерія зв'язку. Іонізаційна ізомерія. Структурна ізомерія. Просторова інтерпретація координаційних чисел. Основні ліганди координаційних сполук. Класифікація КС за типом лігандів та структурним принципом.	4
3	Основні принципи синтезу. Рівноважні методи синтезу та механізми реакцій заміщення лігандів. Вплив центрального іону та лігандів на реакції комплексоутворення. Огляд методів дослідження координаційних сполук та їхнє застосування для вивчення зв'язку центральний атом-ліганд.	4
4	Практичні аспекти застосування координаційних сполук в біології, медицині, сільському господарстві та металокомплексному каталізі.	4

9. Форми контролю і методи оцінювання (у т.ч. критерії оцінювання результатів навчання)

Поточний контроль усне опитування за темами лекційного курсу, участь в дискусії, додаткова робота, письмове складання іспиту. Формами поточного контролю є:

- а) тестові завдання з вибором однієї правильної відповіді, з визначенням правильної послідовності дій, з визначенням відповідності, з визначенням певної ділянки на фотографії чи схемі («розпізнавання»);
- б) індивідуальне усне опитування, співбесіда;
- в) розв'язання типових ситуаційних задач;
- д) контроль практичних навичок;

Комплексне оцінювання навчальної діяльності здійснюється виставлення традиційної оцінки, яка конвертується у бали відповідно у кожному з занять, аспірант отримує на практичному занятті: оцінку «відмінно» - якщо він виконав правильно не менше 90% навчальних завдань; оцінку «добре» - якщо він виконав правильно не менше 80% навчальних завдань; оцінку «задовільно» - якщо він виконав правильно не менше 60% навчальних завдань; оцінку «незадовільно» - якщо він виконав правильно менше 60% навчальних завдань; На кінцевому етапі заняття викладач виставляє набрану суму балів і традиційну оцінку в журналі успішності.

Самостійна робота аспіранта оцінюється на практичних заняттях і є складовою підсумкової оцінки аспіранта.

Підсумковий контроль. Загальна система оцінювання проводиться по завершенню вивчення дисципліни у вигляді іспиту. Шкали оцінювання національна та ECTS.

10. Питання для підсумкового контролю

1. Визначення координаційних сполук, основні поняття координаційної хімії, історичні відомості про становлення координаційної хімії. Координаційна теорія А. Вернера. Сучасна координаційна теорія.
2. Хелатний ефект. Правило циклів Л.А.Чугаєва.
3. Класифікація координаційних сполук (за природою лігандів, ядерністю, зарядом координаційної сфери). Типи ізомерії координаційних сполук.
4. Вплив центрального атома і лігандів на реакції комплексоутворення. Емпіричні правила взаємного впливу лігандів (Пейроне, Йоргенсена, Черняєва, Таубе). Принцип Пирсона
5. Комплексоутворення в розчинах, стійкість комплексних сполук та фактори, що впливають на стійкість комплексів.
6. Хімічний зв'язок в координаційних сполуках. Метод валентних зв'язків.

7. Методи синтезу та дослідження координаційних сполук. Реакції темплатного та фотохімічного синтезу. Електронні спектри і забарвлення координаційних сполук.
8. Просторова інтерпретація координаційних чисел. Типи координаційних поліедрів. Основні ліганди координаційних сполук.
9. Хімічний зв'язок в координаційних сполуках. Метод молекулярних орбіталей.
10. Хімічний зв'язок в координаційних сполуках. Теорія кристалічного поля. Енергія стабілізації кристалічними полями різної симетрії.
11. Які фактори впливають на структуру комплексних сполук у координаційній хімії?
12. Які методи можна використовувати для визначення структури координаційних сполук?
13. Як відбувається обмін лігандів у координаційних сполуках?
14. Як впливає величина атомного радіусу на тип і геометрію координаційного сполуку?
15. Як регулюється хімічна активність координаційних сполук?
16. Як визначається стабільність координаційних сполук та їхні термодинамічні властивості?
17. Як впливає кристалічна структура на властивості координаційних сполук?
18. Як відбувається перехід між різними геометричними структурами у координаційних сполуках?
19. Які механізми взаємодії між металами та лігандами призводять до утворення хімічних зв'язків у координаційних сполуках?
20. Як змінюється спектральна поведінка координаційних сполук залежно від природи лігандів?

11. Розподіл балів

Форма для іспиту

Поточний та періодичний контроль		Підсумковий контроль (іспит)	Сума балів
Змістовий модуль №1	Змістовий модуль №2		
40	20	40	100

Шкала оцінювання: національна та ECTS

Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою	
		для іспиту	для заліку
90-100	A	відмінно	зараховано
82-89	B	добре	
74-81	C		
64-73	D	задовільно	
60-63	E		
35-59	Fx	незадовільно з можливістю	не зараховано з можливістю

		повторного складання	повторного складання
0-34	F	незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни	не зараховано з обов'язковим повторним вивченням дисципліни

12. Рекомендована література

Основна

1. Хімія координаційних сполук / В.О. Стародуб, О.В. Берзеніна, Т.М. Стародуб, О.В. Штеменко. – Д.: ДВНЗ УДХТУ, 2016 – 286 с
2. Чундак С.Ю., Барчій І.Є. Основи хімії комплексних сполук: навчальний посібник. Ужгород: Вид-во УжНУ «Говерла», 2019. 133 с. ISBN 978-617-7333-93-6
3. Купчик О.Ю. Вибрані питання (Координаційна хімія. Стереохімія): навчальний посібник. – Чернігів: НУ «Чернігівська політехніка», 2020. – 90 с.
4. Координаційна хімія. Номенклатура, ізомерія і будова: навчальний посібник / Г. М. Розанцев, С. В. Радіо, К. В. Борисова, Н. І. Гумерова, К. В. Єрошина. – Вінниця: ДонНУ імені Василя Стуса, 2017. – 102 с.

Додаткова

1. Скопенко В. В. Координаційна хімія / В.В. Скопенко, Л.І. Савранський. – К.: Либідь, 2004 – 423 с.
2. Стародуб В. А. Общая химия / В.А. Стародуб. – Х.: Фолио, 2007 – 378 с.
3. Алексєєв С.О. Хімія координаційних сполук / С.О. Алексєєв. – К.: ВПЦ Київський університет, 2010 – 159 с.
4. Скопенко В.В. Зуб. В.Я. Практикум з координаційної хімії. – К.: Вид. КНУ. – 2003. – 300 с.
5. В. Скопенко, Л. Савранский Современные проблемы координационной химии. Химические формы комплексов металлов в газовой фазе и растворах. - К.: Лыбидь, 2010 – 288 с.
6. Хімія комплексних сполук : навчальний посібник / С. О. Алексєєв. – К. : ВПЦ "Київський університет", 2010. – 159 с.
7. Lawrance, Geoffrey A. Introduction to coordination chemistry. 2010 John Wiley & Sons Ltd.