



СОФИЙСКИ УНИВЕРСИТЕТ “Св. Кл. Охридски”

ФАКУЛТЕТ ПО ХИМИЯ И ФАРМАЦИЯ

ПРОГРАМА

ЗА ДЪРЖАВЕН ИЗПИТ

на образователно-квалификационна степен “Бакалавър”
за специалности “Химия и информатика” и
“Химия и английски език”

I. Строеж на веществото

1. Квантово-механичен модел за строежа на атома

Уравнение на Шрьодингер за H-атом - вълнова функция и собствени стойности (физически смисъл). Анализ на решението на стационарното уравнение - квантови числа, атомна орбитала. s-, p-, d- и f-АО (енергия, форма, пространствена насоченост). Принципи и правила на изграждане на електронната обвивка на многоелектронни атоми (принцип на най-ниската енергия, правило на Хунд, принцип на Паули). Мултиплетност. Основно и възбудено състояние на атома.

2. Теория на химичната връзка

Основни характеристики на химичната връзка в молекулата - дължина, енергия и полярност на химичната връзка. Модел на йонната връзка. Енергия на йонната връзка при двуатомна молекула.

Метод на валентните връзки (МВВ): основни характеристики - разпределение на електронната плътност при H_2 . Припокриване на атомните орбитали - σ , π и δ - връзки. Хибридизация на АО, условия за възникване. Видове хибридизации с участието на s, p и d-орбитали. Хибридизация и пространствен строеж на молекулите. Донорно-акцепторен механизъм за образуване на ковалентна връзка. Теория за резонанса. Делокализирани π връзки. Недостатъци на МВВ.

Метод на молекулните орбитали (ММО): възникване на молекулните орбитали (МО); свързващи, несвързващи и антисвързващи МО (разпределение на електронната плътност). Енергетични диаграми на двуатомни молекули на елементите от I и II период на периодичната система (стабилност и магнитни свойства).

Химична връзка при координационните съединения: структура на комплекса: комплексообразувател, лиганди, координационно число. МВВ: донорно-акцепторно взаимодействие. Хибридизация и геометрия на комплексите. Външно- и вътрешноорбитални, високо- и нискоспинови комплекси. Примери. Други теории на химичната връзка при координационни съединения – същност. Ефект на Ян-Телер – геометрична стабилност.

Електрични свойства на молекулите: диполен момент (постоянен и индуциран); диполен момент и молекулна геометрия; поляризуемост; хиперполяризуемост.

Междумолекулни взаимодействия: произход и класификация. Водородна връзка – природа и характеристики.

II. Периодична система на елементите

1. Номенклатура на неорганичните съединения по IUPAC.
2. Строеж на периодичната система в съответствие със строежа на електронната обвивка на атомите.
3. Електронна конфигурация на атомите на елементите от I до VIII период на периодичната система.
4. Основни особености при изграждане на електронната обвивка на атомите на елементите.
5. Периодично изменящи се свойства на химичните елементи: атомни и йонни радиуси – лантаноидно свиване, йонизационна енергия, електронно сродство, електроотрицателност. Тенденции в периода, главната и вторична подгрупи. Йонизация на атомите на d- елементите.
6. Закономерности в изменението на химичните свойства на елементите в главните и вторични подгрупи и в периода.
7. Особенности в свойствата на елементите от II-ри период на периодичната система (диагонално сходство).

III. Химични процеси

1. **Феноменологична термодинамика**
Принципи на термодинамиката. Функции на състоянието: вътрешна енергия, енталпия, енергия на Хелмхолц, енергия на Гибс. Условия за термодинамично равновесие. Посока на природните процеси. Критерии за протичане на спонтанен процес. Химичен потенциал.
2. **Статистическа термодинамика**
Разпределение на Болцман. Ентропия и термодинамична вероятност (уравнение на Болцман).
3. **Химично равновесие**
Закон за действие на масите – равновесна константа K_p , K_c и K_x . Уравнения на реакционната изобара и изохора.
4. **Приложение на химичното равновесие в анализа**
Протолитни равновесия. Протолиза във водни и неводни разтвори. Изчисляване на pH във водни разтвори на протолити. Буфери - избор на подходящ буфер.
Количествено характеризиране на комплексобразователното равновесие с отчитане на α -фактори.
Равновесия при малкоразтворими съединения. Количествено характеризиране на условията за утаяване и разтваряне на утайките.
Окислително-редукционни равновесия. Електроден потенциал и фактори, определящи стойността му.
5. **Химична кинетика**
Скорост на химичните реакции. Молекулност и порядък. Кинетика на прости реакции (нулев, първи и втори порядък). Кинетика на обратими реакции. Успоредни и последователни реакции – скоростоопределящ етап. Каталитични реакции и кинетика на ензимни реакции. Уравнение на Арениус.
6. **Електрохимия**
Електрохимична термодинамика. Уравнение на Нернст. Теория на Дебай-Хюкел.

IV. Фазови превръщания, разтвори и смеси

1. **Фазови преходи първи вид**
Правило на фазите на Гибс. Уравнения на Клапейрон-Клаузиус. Топлина на фазов преход. Фазови диаграми (вода).
2. **Термодинамика на разтворите и течните смеси**
Идеални разтвори. Закони на Раул. Осмотично налягане – закон на Вант Хоф.

3. Концентрации и активност на разтворите, концентрационни величини. Йонна сила на разтвора.

4. Разтвори на електролити

Теория на електролитната дисоциация

Степен на дисоциация и фактори, които я определят, дисоциация на слаби електролити (дисоциационна константа).

Теория на силните електролити

Протонна активност във водни разтвори, рН. Приложимост към различни протолитни системи.

Теории за киселините и основите

Класически представи на Арениус и развитието им. Протолитна теория – основни положения, недостатъци. Киселинно-основно равновесие – сила на протолита.

Хидролиза на соли

Механизъм (поляризиращо действие на йоните върху водните молекули), хидролиза по катион, по анион, по катион и анион, хидролизна константа.

Стабилност на комплекси

Стабилитетни константи: степенни и общи; концентрационни и термодинамични. Условни стабилитетни константи; начин за пресмятане; приложение.

Разтворимост

Произведение на разтворимост; температурна зависимост. Условно произведение на разтворимост: начин за пресмятане; приложение.

V. Повърхностни явления

Гранични повърхности. Повърхностно напрежение. Адсорбционна изотерма на Гибс. Повърхностно активни вещества. Уравнение на Шишковски. Моделни адсорбционни изотерми – изотерми на Хенри, Лангмюир,. Неразтворими монослое на фазовата граница вода/въздух.

VI. Свойства на някои елементи и съединения

Амоняк

Строеж на молекулата. Физични свойства. Химична активност- характерни типове реакции. Равновесие в системата $\text{NH}_3 - \text{H}_2\text{O}$. Амониени соли – разтворимост, хидролиза, термична устойчивост.

Сяроводород

Физични свойства. Равновесие във воден разтвор. Химична активност. Сяроводородът – основна суровина за производство на сяра. Източници, получаване в чист вид.

Оксокиселини на сярата. Сярна киселина

Физични свойства. Киселинни и окислителни свойства. Соли на сярната киселина: разтворимост, хидролиза, термична устойчивост. Стипци и шьонити – състав, дисоциация във воден разтвор.

Въглероден диоксид

Строеж на молекулата. Физични и химични свойства. Равновесие в системата $\text{CO}_2 - \text{H}_2\text{O}$. Карбонати на елементите от IA и IIA групи – разтворимост, хидролиза, термична устойчивост.

Желязо

Физични свойства. Химична активност. Стабилност на степените на окисление Fe(II) и Fe(III).

VII. Неорганични производства, металургия

1. **Получаване на сярна и сярна киселина.** Метод на Клаус за производство на сярна. Контактен метод за производство на сярна киселина: получаване и пречистване на газовата смес. Скорост и равновесие на каталитичната реакция. Абсорбция на SO_3 до сярна киселина и олеум. Ограничаване на емисиите от инсталациите за сярна киселина.
2. **Получаване на калцинирана сода по метода на Солвей.** Суровини и етапи на производството. Оптимални условия за производството на калцинирана сода – фазова диаграма на системата $\text{NaHCO}_3 - \text{NaCl} - \text{NH}_4\text{Cl} - \text{NH}_4\text{HCO}_3 - \text{H}_2\text{O}$. Мерки по опазване на околната среда при производство на сода.
3. **Металургия на медта.** Обогаляване на медните руди (флотация). Основни етапи на пирометалургията на медта: окислително стапяне на халкопиритни концентрати, конверторно преработване на щайна, окислителна (огнева) рафинация на медта до черна мед. Електрорафинация на черна мед. Мерки по опазване на околната среда при производство на мед.
4. **Пречистване на води.** Технологии за пречистване на води за промишлени нужди; очистване на промишлени води. Технологии за пречистване на води за битови нужди; пречистване на битови води. Методи за опресняване на морска и океанска вода.

VIII. Органична химия

1. **Електронни ефекти в органичните молекули.** Индукционен ефект. Ефект на спрягане (мезомерен ефект).
2. **Пространствен строеж на органичните съединения.** Стереохимични формули - проекционни формули на Фишер и Нюман. Изомерия и видове изомери. Конституция, конфигурация и конформация. Пространствена изомерия. Енантиомерия при асиметричен въглероден атом. π -Диастереоизомерия (геометрична изомерия).
3. **Алкени и диени.** Реакции на електрофилно присъединяване (механизъм и стереохимичен ход). Присъединяване на халогени, на халогеноводороди, хидратация (стабилност на междиннообразуващите се карбониеви йони). Окисление. Електрофилни присъединителни реакции към спрегнати диени, 1,2- и 1,4-присъединяване. Циклоприсъединяване.
4. **Алкени.** Електрофилни присъединителни реакции – присъединяване на халогени, на халогеноводород, на вода (реакция на Кучеров).
5. **Ароматни въглеводороди (арени).** Електрофилни заместителни реакции – механизъм. Реакции на халогениране, нитриране, сулфониране и алкилиране и ацилиране по Фридел-Крафтс. Ориентиращ ефект на заместителите при реакциите на електрофилно заместване (електронни ефекти, стабилност на σ -комплексите).
6. **Монохалогенопроизводни на алканите.** Реакции на нуклеофилно заместване. Механизъм на моно- и бимолекулно заместване. Стереохимичен ход на реакциите на нуклеофилно заместване. Превръщане в алкохоли, в етери, в нитрили. Механизъм на моно- и бимолекулно елиминиране.
7. **Алкохоли и феноли.** Киселинност и основност. Механизъм на моно- и бимолекулно елиминиране.
8. **Алдеhide и кетони.** Реакции на нуклеофилно присъединяване към карбонилна група – механизъм. Взаимодействие с кислородни нуклеофили – образуване на полуацетали и ацетали. Реакции с азотни нуклеофили – образуване на азометини, оксими, хидразони. Редукция на карбонилните съединения. $\text{C}=\text{N}$ -кисели свойства на алдеhide и кетони - енолизация под действието на основи. Алдолна реакция.
9. **Монокарбоксилни киселини.** Киселинно-основни свойства. Влияние на заместителите във въглеводородния остатък върху силата на киселините. Реакции на ацилно нуклеофилно заместване – получаване на киселинни халогениди, анхидриди, естери, амиди.

10. **Функционални производни на киселините.** Реакции на ацилно нуклеофилно заместване – механизъм на реакциите. Сравнение на реакционната способност на функционалните производни на киселините. **Киселинни хлориди и анхидриди.** Реакции – хидролиза, взаимодействие с алкохоли, с амоняк и амини. **Естери.** Реакции – хидролиза в кисела и основна среда, редукция.
11. **Монозахариди и дизахариди.** Монозахариди - номенклатура, структура и стереоизомерия. Циклична структура на монозахаридите: D-глюкоза, D-маноза и D-фруктоза – образуване на полуацетали. Формули на Хауърд, конформационни формули. Реакции на монозахаридите – редукция, окисление, образуване на цианхидрини, гликозиди, етери и естери. Дизахариди – номенклатура и структура. Захароза, лактоза, малтоза и целобиоза.
12. **Амини.** Основност на алифатни и ароматни амини. Влияние на заместителите във въглеродния остатък върху основността на амините. Реакции на алкилиране и ацилиране. Получаване и свойства на арендиазониеви соли. Заместване на диазогрупата с водороден атом, с хидроксилна група, с халогенен атом, нитро и циано група (реакция на Зандмайер).
13. **Хетероциклени съединения.** Пирол, фуран, тиофен – структура и ароматен характер. Киселинни и основни свойства на пиrolа. Реакции на електрофилно ароматно заместване при пирол, фуран, тиофен. **Пиридин** – структура и ароматен характер. Основност. Реакции на нуклеофилно ароматно заместване.

IX. Технология на основния органичен синтез

1. Синтези на основата на въглероден оксид. Промислени източници. Производство на метанол.
2. Синтези на основата на парафини. Източници за получаване на парафинови въглеводороди. Производство на хлорни производни на метана.
3. Синтези на основата на олефини. Суровинни източници. Производство на дихлоретан, етанол, етиленов оксид, етилен хлорхидрин и етиленгликол.
4. Синтези на основата на ацетилен. Суровинни източници. Производство на ацеталдехид и оцетна киселина чрез окислението му.

X. Полимери

1. Верижна полимеризация: определение, видове, елементарни реакции и кинетика. Съполимеризация.
2. Поликондензация: определение, видове, управляващи параметри и основни зависимости при равновесната бифункционална поликондензация.
3. Най-важни синтетични полимери: синтез, свойства и области на употреба. Биополимери: полизахариди, лигнин, белтъци и нуклеинови киселини.

XI. Методи за анализ

1. Количествен обемен анализ - принцип и приложение: протонометрия, комплексометрия, утаечен обемен анализ, редоксиметрия.
2. Електроаналитични методи - предимства и недостатъци: Потенциометрия.
3. Спектрални методи за количествен анализ – атомна абсорбционна и емисионна спектрометрия. Рентгенови и ядрени методи.
4. Спектроскопски методи за количествен и структурен анализ: методи на молекулната спектроскопия, основани на електронни (UV/Vis, спектрофотометрия), вибрационни (ИЧ) и ротационни преходи (ЯМР).

Литература

1. Лазаров Д., *Неорганична химия*, Унив. изд. “Св. Кл. Охридски”, София, 2019.
2. Панайотов И., *Увод в биофизикохимията*, Унив. изд. “Св. Кл. Охридски”, София, 2000.
3. Atkins P., *Physical Chemistry*, Wiley-VCH, Weinheim, 2001.
4. Соколова А., *Химична термодинамика*, Унив. изд. “Св. Кл. Охридски”, София, 2001.
5. Бончев П. Р., *Увод в аналитичната химия*, III изд., Наука и изкуство, София, 1985.
<https://www.uni-sofia.bg/index.php/bul/layout/set/print/content/download/171954/1207430/version/1/file/%D0%A3%D0%B2%D0%BE%D0%B4+%D0%B2+%D0%B0%D0%BD%D0%B0%D0%BB%D0%B8%D1%82%D0%B8%D1%87%D0%BD%D0%B0%D1%82%D0%B0+%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F+-%D0%91%D0%BE%D0%BD%D1%87%D0%B5%D0%B2.PDF>.
6. Г. Пеков “*Аналитична химия. Химични методи за анализ*”, Университетско издателство “Св. Кл. Охридски”, София, 2010.
7. Борисова Р., *Основи на химичния анализ*, Водолей, София, 2009.
8. Хокинг М. Б., *Съвременни химични технологии и контрол на емисиите*, Унив. изд. “Св.Кл. Охридски”, София, 2002.
9. Петров Г., *Органична химия*, Унив. изд. “Св. Кл. Охридски”, София, 2009.
10. McMurry J., *Organic Chemistry*, Brooks, 2012.
11. Solomons T. W. G., *Organic Chemistry*, Wiley, 2007.
12. Иванов С., *Органична химична технология*, Наука и изкуство, София, 1988.
13. Консулов В., *Органична химична технология*, Унив. изд., Шумен, 2001.
14. Панайотов И., Факиров Ст., *Химия и физика на полимерите*, Унив. изд. „Св. Кл. Охридски“, София, 2005.
15. Крисчън Г., О’Рейли Дж., *Инструментален анализ*, Унив. изд. "Св. Кл. Охридски", 1998.

Програмата е утвърдена от Факултетния съвет на Факултета по химия и фармация на 14.05.2020.