

СОФИЙСКИ УНИВЕРСИТЕТ “Св. КЛИМЕНТ ОХРИДСКИ”

Факултет по химия и фармация

Катедра Неорганична химия

ПРОГРАМА

за провеждане на конкурсен изпит за докторанти по професионално направление 4.2. Химически науки, специалност Неорганична химия

ЧАСТ ПЪРВА

1. Химична връзка: същност, основни характеристики, класификация в зависимост от разпределението на електронната плътност в молекулата.

Йонна връзка. Класически представи на Косел. Електростатичен модел – енергиен баланс (кулоново стабилизиране). Поляризация на йоните. Свойства на йонната връзка.

2. Ковалентна връзка – метод на валентните връзки. Същност, приложение към водородната молекула (симетрична и асиметрична вълнови функции, енергия и електронна плътност при двете състояния). Класификация на ковалентните връзки (σ -, π -и δ -връзки). Кратни връзки. Свойства на ковалентната връзка. Хибридизация на АО. Донорно-акцепторен механизъм за образуване на ковалентна връзка. Делокализирана връзка.

3. Ковалентна връзка – метод на молекулните орбитали. Същност на метода, прилики и разлики между атомни, хибридни и молекулни орбитали. Същност на варианта ЛКАО-МО и приложението му към водородната молекула (свързваща и антисвързваща МО – енергия и разпределение на електронната плътност), електронна структура на двуатомните молекули и молекулни йони на елементите от I период и на двуатомните молекули на елементите от II период (устойчивост на молекулите и йоните, порядък, енергия и дължина на връзката, магнитни свойства на молекулите). Двуатомни хетероядрени молекули – полярна връзка.

4. Кординационни съединения.

4.1. Теория на Вернер: основни понятия (комплексообразувател, координационно число, дентатност - хелати), основни положения от номенклатурата на координационните съединения, стабилност – стабилитетна константа.

4.2. Природа на химичната връзка в координационни съединения.

4.2.1. МВВ: хибридизация на АО на комплексообразувателя, вътрешно- и външноорбитални, високоспинови и нискоспинови комплекси (магнитни свойства), двуядрени комплекси. Недостатъци на МВВ.

4.2.2. Теория на кристалното поле: основни положения, енергетични нива на d-орбиталите в сферично, октаедрично и тетраедрично поле (параметър на разцепване, спектروхимични редове, ниско- и високоспинови комплекси), магнитни и оптични свойства. Недостатъци на ТКП.

5. Химични процеси: определение и основни характеристики.

Химична термодинамика: определение, термодинамични функции (вътрешна енергия, първи принцип на термодинамиката, енталпия, втори принцип, ентропия, свободна енергия на Гибс). Посока на спонтанните процеси. Условия за равновесие в изотермно-изобарни системи.

6. Химична кинетика. Скорост на химичните реакции. Зависимост на скоростта от концентрацията на реагиращите вещества - скоростна константа, молекулност, скоростоопределящ етап, порядък на химичните реакции и представа за определянето му. Зависимост на скоростта от температурата - уравнение на Арениус и приложението му за определяне на скоростната константа, предекспоненциален множител. Активираща енергия (физичен смисъл), ентропия на активация.

7. Химично равновесие. Химична обратимост на реакцията. Равновесно състояние - особености. Равновесна константа - реакционна изотерма. Зависимост на равновесната константа от температурата - реакционна изохора и изобара. Равновесието и различни външни въздействия. Стационарно състояние.

8. Разтвори на електролити.

8.1. Теория на Арениус за електролитната дисоциация, степен на електролитна дисоциация. Дисоциация на слаби и средни по сила електролити, константа на дисоциация и връзката ѝ със степента на дисоциация.

Елементи от теорията на силните електролити. Активност, йонна сила. Произведение на разтворимост – образуване, разтваряне и превръщане на утайки, влияние на други вещества върху разтворимостта на утайките.

8.2. Теории за киселините и основите: протолитна теория, солватна теория, теория на Люис.

Автопротолиза на протонните разтворители, йонно произведение на водата, водороден експонент.

Хидролиза на соли: същност, механизъм, количествено описание; фактори, определящи степента на хидролиза.

ЧАСТ ВТОРА

s- Елементи

1. Първа група

1.1. Обща характеристика на елементите. Електронна конфигурация на атомите, закономерности в изменението на атомните радиуси, йонизационната енергия, електроотрицателността и степента на окисление.

1.2. Прости вещества: физични свойства, получаване, химична активност. Съединения с кислорода – (оксиди, пероксиди, супероксиди), хидроксиди (получаване на натриева основа); хидриди; бинарни съединения с халогените и халкогенни елементи, нитрати, сулфати, карбонати.

2. Втора група

2.1. Виж въпрос 1.1.

2.2. Прости вещества: физични свойства, получаване, химична активност. Съединения с кислорода (оксиди и пероксиди), хидроксиди, хидриди, бинарни съединения с по-електроотрицателни елементи, калциев карбид, соли с кислородсъдържащи киселини (карбонати, сулфати, гипс).

p- Елементи

3. Тринадесета група

3.1. Виж въпрос 1.1.

3.2. Бор. Просто вещество: физични свойства (алотропни модификации), химична активност. Съединения: борани – химична връзка (електрондефицитни съединения), реакционна способност; бориди, оксид, борна киселина и солите ѝ.

3.3. Алюминий. Просто вещество: физични свойства, получаване, химична активност – пасивиране, алуминотермия. Съединения – оксид, хидроксид, алуминати, съединения с по-електроотрицателни елементи (халогениди, сулфиди, нитриди, карбиди), сулфати, стипци.

4. Четирнадесета група

4.1. Виж въпрос 1.1.

4.2. Въглерод. Особеност в електронната конфигурация, склонност към образуване на вериги, хибридизация. Просто вещество – алотропни модификации (хибридизация, структура, свойства, приложение), химична активност. Съединения: карбиди (солеобразни, металообразни, ковалентни), оксиди (структура на CO по ММО, редукиционни свойства, карбонилни комплекси (образуване по МВВ на моноядрени и клъстерни комплекси), цианиди (структура на йона, цианидни комплекси, циановодородна киселина), въглеродна киселина и солите ѝ.

4.3. Силиций. Физични свойства (полупроводници, алотропни модификации), получаване, химична активност (образуване на хомо- и хетеровериги). Съединения: силани, силициди, халогениди (хидролиза), съединения с азот и въглерод, диоксид (структура, полиморфни форми).

5. Петнадесета група

5.1. Виж въпрос 1.1.

5.2. Азот. Просто вещество: молекула по МВВ и ММО, физични свойства, получаване, химична активност (взаимодействие с алкални метали). Съединения на азот (-III): нитриди, амоняк (молекула по МВВ, течен амоняк, химични свойства, равновесие в системата $\text{NH}_3 - \text{H}_2\text{O}$, производни на амоняка, амониеви соли); азот (-II): хидразин; азот (-I): хидроксиламин. Азотни оксиди.

5.3. Фосфор. Просто вещество: физични свойства (алотропни модификации), получаване, химична активност. Съединения: оксиди, фосфиди (фосфин), киселини и солите им, халогениди.

6. Шестнадесета група

6.1. Виж въпрос 1.1.

6.2. Кислород. Просто вещество: физични свойства (алотропия), структура на молекулата на озон, получаване, химична активност. Съединения с водорода: вода (структура на молекулата, аномални физични свойства, химични свойства, тежка вода), кристалохидрати и клатрати; водороден пероксид (структура, получаване, киселинни и окислително-редукционни свойства, диспропорциониране); оксиди (класификация).

6.3. Сяра. Просто вещество: физични свойства (алотропни модификации), получаване (метода на Фраш и Клаус), химична активност. Съединения: сяроводород (киселинни и редукционни свойства), сулфиди и персулфиди, халогениди, оксиди, кислород съдържащи киселини.

7. Седемнадесета група

7.1. Виж въпрос 1.1.

7.2. Флуор. Просто вещество: физични свойства, получаване, химична активност.

Съединения с кислорода, флуороводород (димеризация, киселина – сила, свойства, соли)

7.3. Хлор, бром, йод. Прости вещества: физични свойства, получаване, химична активност – взаимодействие с водород (верижна реакция) и с вода. Съединения с водорода (киселинни и редукционни свойства). Кислород съдържащи киселини и солите им (киселинни и окислителни свойства).

d- Елементи

8. Атоми на d-елементите - електронна конфигурация в основно състояние. Сравнение на атомните свойства на 3d-, 4d- и 5d- елементите (влияние на лантаноидното свиване), сравнение със свойствата на s-елементите. Физични свойства на преходните метали. Химични свойства – отнасяне към кислород; отнасяне към други елементи от втори период (B, C, N); отнасяне към киселини и основи. Нестехиометрични оксиди.

9. Оксиди и хидроксиди на 3d-, 4d- и 5d- елементите в различни окислителни състояния – стабилност, свойства, изменение на химичния характер.

10. Координационни съединения на d- елементите в различни окислителни състояния – стабилност, свойства, примери. Сандвичеви комплекси – фероцен, химична връзка във фероцена.

f- Елементи

11. Лантаноиди – електронна конфигурация; изменение на атомните и йонните радиуси; степени на окисление – стабилност. Съединения в различни степени на окисление.

Литература

1. Е. Киркова. Обща химия. Унив. изд. "Св. Кл. Охридски", С., 4^{-то} издание, 2013.
2. Е. Киркова. Химия на елементите и техните съединения. Унив. изд. "Св. Кл. Охридски", С., 4^{-то} издание, 2013.
3. Д. Лазаров. Неорганична химия. Унив. изд. "Св. Кл. Охридски", С., 5^{-то} издание, 2014.
4. Н. Ахметов. Общая и неорганическая химия. Высшая школа, М., 1988.
5. Л. Генов, М. Манева-Петрова. Неорганична химия, т. I и II. Наука и изкуство, С., 1989 и всички др. издания.
6. Б. Дякова. Обща химия. Унив. изд. "Св. Кл. Охридски", С., 1995 и всички др. издания.
7. M. Weller, T. Overton, J. Rourke, F. Armstrong, Inorganic Chemistry, Oxford Univ. Press, 7th ed., 2018.
8. P. Atkins, J. De Palma. Physical Chemistry, Oxford Univ. Press, 9th ed., 2010.
9. F. A. Cotton, G. Wilkinson, C. A. Murillo, M. Bochmann. Advanced Inorganic Chemistry. J. Wiley, New York, ..., 6th ed., 1999.

Октомври, 2022 г.

Ръководител на катедрата:.....

/ проф. Мария Миланова/