



## **ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ "ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ"**

### **ПРОГРАМА ЗА ДЪРЖАВЕН ИЗПИТ**

за специалност КОМПЮТЪРНА ХИМИЯ за придобиване на  
образователно-квалификационна степен Бакалавър

#### **I. СТРОЕЖ НА АТОМА**

- Предпоставки за развитието на съвременната теория за строежа на атома.
- Квантови числа и атомни орбитали. Принципи и правила за изграждане на електронна обвивка на атома. Начини за изразяване на електронната конфигурация на атомите на химичните елементи. Основно и възбудено състояние на атома.
- Съвременни теории за строежа на атома.
- Атомно ядро. Строеж на атомното ядро. Химичен елемент, масово число, изотопи, изобари и изотони.

#### **II. ПЕРИОДИЧЕН ЗАКОН И ПЕРИОДИЧНА СИСТЕМА**

- Периодична система на химичните елементи – структура на периодичната система. Класическа и съвременна формулировка на периодичния закон.
- Връзка между строежа на електронната обвивка на атомите на химичните елементи и мястото им в периодичната система.
- Периодичност в изменението на свойствата на атомите на химичните елементи. Изменение на химичния характер на елементите по групи и периоди.

#### **III. ХИМИЧНИ РЕАКЦИИ**

- Реакции, протичащи без промяна степента на окисление на атомите на химичните елементи (неутрализационни, хидролизни, утаечни и др. реакции).
- Реакции, протичащи с промяна степента на окисление на атомите на химичните елементи. Степен на окисление, окислител, редутор, окисление и редукция. Видове окислително-редукционни реакции.
- Ред на относителната активност на металите (РОАМ). Взаимодействие на металите с разредени и концентрирани разтвори на солна, сярна и азотна киселини.

#### **IV. ХИМИЧНИ СВОЙСТВА НА СЪЕДИНЕНИЯ НА s-, p- и d-елементи.**

- s-елементи. Обща характеристика, свойства. Изменение на химичния характер на съединенията им. Примери.
- p-елементи. Обща характеристика, свойства. Изменение на химичния характер на съединенията им. Примери.
- d-елементи. Обща характеристика, свойства. Изменение на химичния характер на съединенията им. Примери.

#### **V. ХИМИЧНА ТЕРМОДИНАМИКА**

- Принципи на термодинамиката (първи и втори). Вътрешна енергия, енталпия, ентропия, енергия на Хелмхолц и енергия на Гибс.
- Изменението на ентропията ( $\Delta S$ ) – критерий за определяне посоката на процесите и установяване на термодинамично равновесие в изолирани системи.
- Изменение на термодинамичните потенциали ( $\Delta F$  и  $\Delta G$ ) – критерии за определяне посоката и условията за равновесие на химичните процеси в неизолирани системи.
- Топлинни ефекти на химичните реакции. Закон на Хес и неговите следствия. Температурна зависимост на топлинния ефект на реакцията. Уравнения на Кирхоф.

#### **VI. ХИМИЧНО РАВНОВЕСИЕ**

- Закон за действие на масите – равновесна константа  $K_p$ ,  $K_c$  и  $K_x$  при хомогенни и хетерогенни процеси.
- Влияние на концентрацията на реагиращите вещества, външното налягане и температурата върху равновесните системи.
- Реакционна изотерма, уравнения на реакционната изобара и на реакционната изохора.

## VII. ХИМИЧНА КИНЕТИКА И ПОВЪРХНОСТНИ ЯВЛЕНИЯ

- Скорост на химичните реакции. Молекулност и порядък. Активираща енергия. Кинетика на простите реакции (нулев, първи и втори порядък).
- Катализа: същност на каталитичното действие, хомогенна и хетерогенна катализа. Активиране на хомогенно и хетерогенно каталитични процеси.
- Адсорбция върху твърда и течна повърхност. Величини, количествено характеризиращи адсорбцията – дефиниране и изчисляване. Адсорбционни изотерми на Лангмюир, Фройндлих и БЕТ.
- Повърхностно напрежение, зависимост на повърхностното напрежение на течности и разтвори от температурата, концентрацията и природата на разтвореното вещество. Адсорбционна изотерма на Гибс. Повърхностно активни вещества. Уравнение на Шишковски.

## VIII. ЕЛЕКТРОХИМИЯ

- Разтвори на електролити. Електропроводимост на електролитни разтвори (специфична ( $\chi$ ) и еквивалентна ( $\lambda$ ) електропроводимост). Закони на Колрауш.
- Галваничен елемент. Електродвижещо напрежение (ЕДН) на галваничен елемент и връзката му с други величини. Термодинамика на галваничен елемент.
- Електроден потенциал. Уравнение на Нернст - приложение. Видове електроди – електроди от I-ви и II-ри род и редокселектроди.
- Електролизни процеси. Закони на Фарадей.

## IX. ВЪГЛЕВОДОРОДИ

- Строеж и реактивоспособност на въглеродородите. Структурна и стереоизомерия. Химични свойства: заместителни и присъединителни реакции - механизъм. СН-киселинни свойства при алкини. Окисление на въглеродородите. Методи за получаване на въглеродороди. Полимеризация.
- Ароматни въглеродороди - критерии за ароматност - правило на Хюкел. Механизъм на електрофилни заместителни реакции: халогениране, нитриране, сулфониране. Алкилиране и ацилиране по Фридел-Крафтс. Ориентиращ ефект на заместителите при реакции на електрофилно заместване.

## X. КИСЛОРОДСЪДЪРЖАЩИ ПРОИЗВОДНИ НА ВЪГЛЕВОДОРОДИТЕ

- Структура и сравнителна реактивоспособност на алкохоли, феноли, ди- и триоли. Химични свойства: киселинно-основни свойства, реакции на нуклеофилно заместване и елиминиране. Получаване на естери на неорганични и органични киселини. Окисление до карбонилни съединения и карбоксилни киселини. Методи за получаване на хидроксилни производни.
- Алдехиди и кетони. Структура и реактивоспособност. Реакции на нуклеофилно присъединяване към карбонилна група – механизъм на взаимодействие с вода, амоняк, алкохоли, амини, циановодород, Гринярови реактиви и др. СН-киселинни свойства на алдехиди и кетони – енолизация. Реакции при  $\alpha$ -С-атом спрямо карбонилната група – алдолна кондензация, Каницарова реакция и др. Редукция и окисление на карбонилни съединения. Методи за получаване.
- Масни и ароматни карбоксилни киселини. Структура и реактивоспособност. Киселинно-основни свойства. Реактивоспособност на карбоксилната група - механизъм на реакциите на ацилно нуклеофилно заместване за получаване на киселинни халогениди, анхидриди, естери, амиди. Реакции на декарбоксилиране. Реакции във въглеродородната верига. Методи за получаване.
- Функционални производни на карбоксилните киселини - киселинни халогениди и анхидриди, амиди и естери. Сравнение на реакционната способност на функционалните производни на карбоксилните киселини. Характерни химични свойства: хидролиза, преестерификация, Клайзенова кондензация, реакция на Кновенагел, реакция на Перкин. Методи за получаване.

## XI. ОРГАНИЧНИ СЪЕДИНЕНИЯ НА АЗОТА

- Амини - структура и реактивоспособност. Основност на алифатни и ароматни амини. Реакции на алкилиране и ацилиране. Образуване и химични свойства на diaзониеви соли – реакции на diaзотиране и купелуване. Реакция на Зандмайер. Методи за получаване на амини.

## XII. БИООРГАНИЧНА ХИМИЯ

- Въглехидрати - класификация и номенклатура. Монозахариди - структура и стереоизомерия. Циклична структура на монозахаридите: глюкоза, рибоза и фруктоза – образуване на полуацетали. Формули на Хауърт. Аномери и епимери. Реакции за доказване на карбонилната група. Дизахариди. Начини на свързване на монозахаридните остатъци. Свойства. Представители. Полизахариди – видове и представители.

## XIII. ТЕОРЕТИЧНИ ОСНОВИ И ПРИНЦИПИ НА КЛАСИЧЕСКИТЕ МЕТОДИ ЗА АНАЛИЗ

- Киселинно-основни равновесия в аналитичната химия. Протолитна теория. Видове протолитни константи. Водороден експонент - рН. Сила на протолитите - фактори, от които зависи. Буферни разтвори.
- Протонометрия - принцип и класификация. Стандартни разтвори. Титрувални криви при определяне на силни и слаби протолити, влияние на свойствата и концентрацията на анализираният вещество върху профила на титрувалната крива. Киселинно-основни индикатори – принцип на действие и критерии за избор на индикатор.
- Комплексообразователни процеси. Стабилност на комплексите и фактори, от които зависи. Влияние на странични реакции върху стабилността на комплексите,  $\alpha$  - коефициенти и условни стабилитетни константи. Количествен анализ – комплексонометрия. Титрувални криви и металохромни индикатори.
- Утаечно титруване. Принцип и изисквания към реакциите. Стандартни разтвори. Криви на титруване, влияние на условията за анализ върху профила на титрувалната крива. Видове индикатори.
- Окислително-редукционно титруване (Редоксиметрия). Обща характеристика и класификация. Изисквания към реакциите. Принцип на действие на редокс-индикаторите. Перманганометрия и йодометрия - стандартни разтвори, криви на титруване, особености и приложение.

## XIV. ИНСТРУМЕНТАЛЕН АНАЛИЗ

- Електронни преходи в атомите и атомни спектри.
- Атомно-абсорбционен анализ – принцип на метода. Закон на Буге-Ламберт-Беер за светлинната абсорбция. Пламъков и електротермичен атомизатор.
- Емисионен спектрален анализ – източници на възбуждане. Оптико емисионен анализ с индуктивно свързана плазма – принцип.
- Вибрационна спектроскопия. Принципи на инфрачервената и Рамановата спектроскопия – подборни правила, интензитет на ивиците.
- Вибрационен спектър на двуатомна и многоатомна молекула – видове и брой молекулни трептения. Характеристични трептения и фактори, влияещи върху тях.
- Електронна абсорбционна спектроскопия. Подборни правила, видове преходи, интензитет на ивиците.
- Спектроскопия на ядрения магнитен резонанс (ЯМР), физични основи. Химично отместване и спин-спиново взаимодействие в протонния ЯМР.

## XV. СТАТИСТИЧЕСКА ОБРАБОТКА НА ЕКСПЕРИМЕНТАЛНИ ДАННИ

- Представяне на резултати от измерване – средна стойност, стандартно отклонение, относително стандартно отклонение и доверителен интервал;
- Калибриране в количествения анализ – метод на външна калибрация, метод на стандартната добавка и метод на вътрешния стандарт;
- Неопределеност и метрологична проследимост на резултат от изпитване;

## XVI. ПРИЛОЖНА НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ И ЕКОЛОГИЯ И ОПАЗВАНЕ НА ОКОЛНАТА СРЕДА

- Сярна киселина. Суровини. Получаване на сярна киселина по контактния метод. Технология на свързания азот. Производство на амоняк. Пречистване на замърсени газове от аерозоли, газообразни и парообразни компоненти.
- Получаване на метали. Производство на цинк по хидрометалургичния метод и на мед по пирометалургичния метод. Пречистване на промишлени отпадъчни води: механични, физикохимични и химични методи.

## XVII. ПРИЛОЖНА ОРГАНИЧНА ХИМИЯ И ХИМИЯ НА ПОЛИМЕРИТЕ

- Нефт. Физични методи за преработка - атмосферно-вакуумна дестилация. Химични методи за преработка – термичен и каталитичен крекинг. Пречистване (рафинация) на нефтопродуктите. Характеристика на горивата и смазочните масла и основни изисквания спрямо тях.
- Производство и преработка на продукти от растителен произход. Производство на захар – структура, суровини и получаване на захар. Производство и преработка на целулоза – структура, суровини и методи за добиване от дървесина.
- Поликондензация – определение, равновесна и неравновесна, основни зависимости при равновесната поликондензация. Полимеризация – видове, механизъм на радикаловата полимеризация.

## СПЕЦИАЛИЗИРАЩИ ДИСЦИПЛИНИ

### XVIII. Компютърни операционни системи

- Основни функции на операционната система. Конзола и терминал. Операционна система Windows. Работа с файлове.
- Текстобработка. Електронни таблици.

### XIX. Обектно-ориентирано програмиране с JAVA

- Основни елементи на езика JAVA. Променливи, изрази и специални символи. Виртуална машина, компилиране, помощни програми: javac и java.
- Обектно-ориентирано програмиране. Класове в JAVA. Конструктори и деструктори. Атрибути за достъп до полета и методи. Наследяване.

### XX. Подходи за компютърно представяне на структурна информация

- Топологично представяне - таблица на свързаност. Линейни нотации SMILES и SMARTS. Двумерно представяне. Тримерно структурно представяне. Декартови координати и вътрешни координати. Z-матрица. Молекулни повърхнини.
- Молекулни дескриптори за компютърно моделиране в химията. Класификация на дескрипторите. Матрични представяния: матрица на съседство, матрица на топологичните разстояния, матрица на Лаплас. Топологични индекси. Индекси на Уинер, Загреб, Балабан, Рандич (индекси на свързаност). Геометрични дескриптори. 3D индекс на свързаност и 3D индекс на Уинер. Геометрична атомна ексцентричност, радиус и диаметър на молекула. Индекс на овалност.

### XXI. Компютърно моделиране в химията

- Метод на молекулната механика. Дефиниция за силово поле. Повърхнина на Борн-Опенхаймер. Валентно силово поле. Енергетични членове на стеричната енергия. Параметризация на силово поле. Методи за минимизация на енергията. Конформации и конформери. Конформационен анализ.
- Линейна регресия с много променливи. Метод на най-малките квадрати. Полиномиални модели. Статистическо охарактеризиране на коефициентите. Нелинейна регресия.
- QSAR моделиране. Корелации между структура, свойство и активност на съединението. Уравнения на Хамет. Линейни модели на свободната енергия. Анализ на Ханч. Нелинейни QSAR модели. 3D QSAR моделиране - метод CoMFA.

- Компютърно моделиране чрез адитивни схеми. Атомни адитивни схеми (схеми от нулев ред). Адитивни схеми от първи ред. Адитивни схеми от втори ред. Коефициент на разпределение LogP. Моделиране на LogP.
- Химиметрични методи. Класификация по разстояния до центроидите на извадките.
- Метод на кластерния анализ: класификация по единична и пълна връзка.
- Метод на k-най-близки съседни.
- Теория на пертурбациите в изчислителната химия – основни положения. Видове пертурбации при спрегнати системи. Адитивност на пертурбациите от първи и втори ред.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Димитров А., Неорганична химия I част, изд. ПУ, Пловдив, 1998.
2. Лазаров Д., Неорганична химия”, Университетско издателство «Св. Климент Охридски», София, С. 2006.
3. Киркова Е., Химия на елементите и техните съединения, Университетско издателство «Св. Климент Охридски», София, С. 2007
4. Лекова В., Гавазов К., Димитров А., Ръководство за решаване на задачи по обща и неорганична химия, изд. ПУ, Пловдив, 2008
5. Третьяков Ю. Д., Мартыненко Л. И., Григорьев А. Н., Цивадзе А. Ю., Неорганическая химия , Химия элементов, том 1 и том 2, Академкнига, Москва, 2007
6. Дамянов Д., Физикохимия I и II част, изд. СУБ Бургас, 1994 г.
7. P. Atkins, J. de Paula: Atkins' Physical Chemistry. Oxford, University Press, 2006
8. Моллов Н., Учебник по Органична химия, ПУ, 1993 г., 1996 г.
9. Петров Г., Органична химия, изд. СУ, 1996, 2006 г.
10. Бончев П., Увод в аналитичната химия, III изд. Наука и изкуства, София, 1985 г.
11. Борисова Р., Основи на химичния анализ, Водолей 2009
12. Пеков Г., Аналитична химия. Равновесия в разтвор, УИ „Св. Кл. Охридски”, 2008 г.
13. Г. Кристиан, Аналитическая химия, 2 тома, изд. Бином, Лаборатория знания, 2012
14. Андреев Г., Молекулна Спектроскопия, изд. ПУ, Пловдив, 2010 г.
15. Димитров Р., Б. Боянов Неорганична химична технология, изд. ПУ, Пловдив, 2001 г.
16. Иванов Ст., Органична химична технология, Пловдив, изд. ПУ, 1993, 1998 г.
17. Хокинг М., Съвременни химически технологии и контрол на емисиите, УИ „Св. Кл. Охридски”, София, 2002 г.
18. Магаева Сн., Ст. Караиванов, Екологична химия и опазване на околната среда, Булвест 2000, София, 2002 г.
19. Панайотов Ив., Ст. Факиров, Химия и физика на полимерите, УИ „Св. Кл. Охридски”, София, 2005 г.
20. Gasteiger J., Engel T. Chemoinformatics a textbook. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co, 2003 г.
21. Симеонов В. Принципи на обработка на химичните данни. изд. СУ, София, 2000 г.
22. Massart D., Vandeginste B., Deming S., Michotte Y., Kaufman L. Chemometrics: a textbook. Elsevier, 1988.
23. Екел Б. Да мислим на Java. СофтПрес 2001г.
24. Пол МакФедрис, Моят Office 2016, ЗеСТ Прес, 2017
25. A. Leach, V. Gillet, An Introduction To Chemoinformatics, Springer, 2007
26. Лекционни материали по: Обща и неорганична химия, Физикохимия, Органична химия, Биоорганична химия, Аналитична химия, Инструментален анализ, Статистика и метрология в химията, Приложна органична химия, Приложна неорганична химия, Химия на полимерите, Екология и опазване на околната среда и по всички специализиращи курсове