

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Одеський національний університет імені І.І.Мечникова
Факультет хімії та фармації

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Голова приймальної комісії
Ректор ОНУ імені І.І.Мечникова

Вячеслав ТРУБА



В.Труба 2023 р

ПРОГРАМА ФАХОВОГО ВСТУПНОГО ІСПИТУ З ХІМІЇ
ЗА СПЕЦІАЛЬНІСТЮ 102 ХІМІЯ
рівень вищої освіти третій (освітньо-науковий)

ЗАГАЛЬНІ ПОЛОЖЕННЯ

Комплексний вступний іспит до аспірантури зі спеціальності «102 Хімія» передбачає перевірку знань фундаментальних хімічних теорій та закономірностей, сучасної хімічної термінології та номенклатури, особливостей розвитку хімії та умінь використовувати теоретичні знання для розв'язання дослідницьких та практичних завдань у різних умовах.

Програму для складання вступного іспиту зі спеціальності «102 Хімія» галузі 10 Природничі науки розроблено відповідно до Правил прийому в ОНУ імені І.І. Мечникова, стандарту вищої освіти магістра з відповідної спеціальності з урахуванням вимог до знань та вмінь, які необхідні для опанування відповідної освітньо-наукової програми на третьому (освітньо-науковому) рівні вищої освіти

Мета вступного іспиту – виявлення рівня теоретичних знань вступників, наявності практичних навичок, умінь аналізувати хімічні процеси, робити узагальнення та проводити порівняльний аналіз.

Вимоги до рівня підготовленості вступників. Вступники до аспірантури повинні мати відповідний рівень теоретичної і практичної підготовки, який надає можливість оволодіти знаннями, набути умінь та навичок проведення наукових досліджень, необхідних для здобуття наукового ступеня доктор філософії із спеціальності 102 Хімія.

Вступник до аспірантури із спеціальності 102 Хімія має продемонструвати високий рівень теоретичної та практичної підготовки, глибоке розуміння хімічних процесів, здатність використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні із відповідними математичними інструментами для опису природних явищ, а також умінь застосовувати свої знання для вирішення науково-дослідницьких та прикладних завдань.

Вступний іспит проводиться в усній формі.

Рекомендований список літератури для самостійного опрацювання носить орієнтовний характер і не виключає власних ініціатив абітурієнтів у доборі та використанні джерел.

1. ПЕРЕЛІК ПИТАНЬ

Програма включає 9 змістових частин:

1. Загальна хімія

1.1. Будова електронних оболонок атома. Квантова теорія будови атома. Теорія Бора. Постулати Бора. Борівський радіус, швидкість руху електрона, енергія стану електрона. Енергетичні рівні основного та збудженого станів. Спектр атома водню за Бором. Фізичний зміст сталої Рідберга. Енергія іонізації.

Векторна модель атома. Розвиток теорії Бора. Ефекти Зеємана і Штарка. Уявлення Зоммерфельда. Векторні підходи опису стану електрона в атомі. Уявлення про орбітальне, магнітне і спінове квантові числа. Принцип Паулі.

Квантово-механічна модель атома. Корпускулярно-хвильові властивості фотона. Рівняння Планка, Ейнштейна. Основні постулати квантової механіки. Рівняння де Бройля. Хвильові властивості електрона. Принцип невизначеностей Гейзенберга.

Рівняння Шредінгера. Хвильова функція. Фізичний зміст хвильової функції. Висновки із рівняння Шредінгера.

Атом гідрогену (квантово-механічний опис). Полярна система координат. Радіальна складова хвильового рівняння. Залежність радіальної складової та ймовірності розподілу від

квантових чисел. Кутова складова хвильової функції. Полярні діаграми. Вузлова поверхня. s, p, d, f – Атомні орбіталі.

Багатоелектронні атоми. Порядок розподілу електронів по енергетичним рівням і підрівням. Правило Клечковського. Принцип Паулі. Правило Гунда.

1.2. Періодичний закон Д.І. Менделєєва. Періодична система елементів. Періодичність властивостей елементів. Фізичний зміст періодичного закону. Електронні аналоги. Періодичність фізичних та хімічних властивостей елементів. Енергетичні характеристики атома. Вторинна та внутрішня періодичність.

1.3. Хімічний зв'язок та валентність. Метод валентних зв'язків (МВЗ). Розвиток уявлень про валентність та хімічний зв'язок. Крива повної енергії для молекули. Молекула водню за методом Гейтлера-Лондона. Валентність елементів з точки зору МВЗ (спінова теорія валентності). Донорно-акцепторний механізм утворення ковалентного зв'язку.

Основи метода молекулярних орбіталей (ММО). Поняття про молекулярну орбіталь (МО). Двоцентрові та багатоцентрові МО. Положення ММО. Зв'язуючі, антизв'язуючі та незв'язуючі МО. Правила побудови МО. Енергетичні діаграми. Порядок зв'язку.

Опис гомоядерних і гетероядерних молекул за ММО. Енергетичні діаграми для двохатомних гомо-, гетероядерних молекул. Гетероядерні молекули HF, NO, CO. Ізоелектронні частинки. Будова та реакційна здатність молекул. Загальні підходи опису багатоатомних молекул. Система МО для BeH_2 .

1.4. Координаційні сполуки. Номенклатура комплексних сполук. Види ізомерії комплексних іонів (геометрична, оптична, структурна, конформаційна ізомерії, ізомерія зв'язку).

Хімічний зв'язок в координаційних сполуках. Електростатичні уявлення. Метод валентних зв'язків (МВЗ). Зовнішньо- та внутрішньоорбітальні комплекси. Теорія кристалічного поля (ТКП). Параметри розщеплення в залежності від структури комплексу: октаедр (правильний чи викривлений), тетраедр, квадрат. Спектрохімічний ряд лігандів. Низькоспінові та високоспінові комплекси. Прикладні аспекти ТКП. Метод молекулярних орбіталей (ММО) для опису комплексів.

Взаємний вплив внутрішньосферних замісників в координаційних сполуках. Правило Пейроне, Ієргенсена. Закономірність цис-транс-впливу. Теоретична трактовка транс- та цис-впливу в залежності від донорних та акцепторних властивостей лігандів. Галузі застосування координаційних сполук.

2. Неорганічна хімія

2.1. p-Елементи III групи. Алюміній. Будова атома. Мінерали алюмінію (боксит, нефелін, каолін). Виробництво алюмінію. Фізичні і хімічні властивості алюмінію. Оксид і гідроксид алюмінію, «старіння» за рахунок процесів оляції та оксоляції. Будова і властивості алюмінатів, добутих твердофазним синтезом і у водних розчинах. Гідроліз солей алюмінію і алюмінатів. Комплексні сполуки і подвійні солі алюмінію. Сульфід, нітрид, карбонат алюмінію. Гідрид алюмінію і алюмогідриди лужних металів. Сплави алюмінію. Застосування алюмінію та його сполук.

Підгрупа галію. Галій, індій, талій – розсіяні елементи. Вилучення галію, індію, талію із відходів виробництва алюмінію і кольорових металів. Будова атомів галію, індію, талію. Фізичні і хімічні властивості галію, індію, талію. Валентні стани елементів підгрупи галію. Зміна стійкості сполук, що містять елементи підгрупи галію, у ступені окиснення +1 і +3 в ряду галій-індій-талій. Методи одержання сполук одно- і трьохвалентних галію, індію, талію. Особливості окисно-відновних властивостей сполук талію. Кислотно-основні властивості трьохвалентних галію, індію, талію. Амфотерність оксидів і гідроксидів елементів підгрупи галію. Застосування елементів підгрупи галію.

2.2. p-Елементи IV групи. Силіцій. Будова атома силіцію. Основні ступені окиснення. Природні сполуки силіцію. Хімічні властивості силіцію. Сполуки його з металами і неметалами. Силіциди. Силани. Сполуки силіцію з галогенами. Кисневі сполуки силіцію. Оксид

силіцію(IV), силікатні кислоти. Силікати, їх гідроліз. Силікагель. Силіційорганічні сполуки. Застосування силіцію та його сполук. Діагональна подібність у періодичній системі.

Германій, олово, плюмбум. Природні сполуки. Будова атомів, характерні ступені окиснення. Зміна кислотно-основних властивостей і окисно-відновної здатності сполук германію, олова, плюмбуму в ряду ступенів окиснення. Добування германію, олова, плюмбуму. Їх фізичні і хімічні властивості. Найважливіші сполуки германію(IV): оксид, гідроксид, германати, тетрахлорид германію(IV), гідриди і металоорганічні сполуки. Найважливіші сполуки олова (II) і олова(IV): їх одержання, склад, будова, властивості. Оксид олова(II), гідроксид олова, оксид олова(IV), олов'яні кислоти, станати.

Найважливіші сполуки плюмбуму(II) і (IV), сурик, плюмбіти і плюмбати. Розчинні і нерозчинні солі плюмбуму(II) і (IV). Комплексні сполуки олова і плюмбуму. Застосування сполук германію, олова і плюмбуму.

2.3. d-Елементи. d-Елементи I групи (Cu, Ag, Au). Загальна характеристика d-елементів I групи. Будова атомів елементів підгрупи купрум. Переробка природних сполук купрум, срібла, золота. Фізичні і хімічні властивості купрум, срібла, золота. Сполуки купрум (I, II). Оксиди. Гідроксиди, солі купрум(I, II) Гідроліз солей купрум(II). Сполуки купрум(III) – купрати.. Найважливіші комплексні сполуки купрум (I, II). Сполуки срібла(I) - оксид, гідроксид, розчинні і нерозчинні солі. Галогенічні, аміачні, тіосульфатні комплексні сполуки срібла(I). Оксиди золота та та їх гідрати. Аурати. Солі і комплексні сполуки золота, їх склад, будова, властивості. Золотохлороводнева кислота. Зміна характерних ступенів окиснення в ряду купрум-срібло-золото.

d-Елементи II групи (Zn, Cd, Hg). Загальна характеристика d-елементів II групи. Будова електронних оболонок атомів цинку, кадмію, ртуті. Добування цинку, кадмію, ртуті. Фізичні і хімічні властивості металів підгрупи цинку. Сплави, що містять цинк, кадмій, ртуть. Амальгами. Зміна кислотно-основних властивостей оксидів і гідроксидів в ряду цинк(II) - кадмій (II) - ртуть(II). Гідроліз солей двохвалентних цинку, кадмію, ртуті. Амфотерність цинку(II) та його сполук. Зміна типу зв'язку в аналогічних сполуках цинку, кадмію, ртуті. Комплексні сполуки цинку(II), кадмію(II), ртуті(II). Сполуки ртуті(I), одержання, будова, властивості. Оксид і гідроксид ртуті(I). Солі ртуті(I). каломель. Застосування сполук цинку, кадмію, ртуті.

Сімейство платинових металів. Будова атомів елементів групи платинових металів. Знаходження у природі. Самородна платина. Вилучення елементів групи платинових металів із руд. Фізичні і хімічні властивості платинових металів. Закономірності в зміні стійкості характерних ступенів окиснення в сполуках платинових металів. Сполуки рутенію і осмію в ступені окиснення +8. Солі родію(III), іридію(III).

Сполуки паладію(II), платини(II) і (IV). Платино-хлороводнева кислота, її солі. Фториди платини. Значення комплексних сполук в хімії платинових металів. Будова і властивості комплексних сполук платина (IV) і (II). Інертність комплексів платини. Явище ізомерії. Застосування платинових металів та їх сполук в промисловості, науці, та медицині.

3. Аналітична хімія

3.1. Типи хімічних реакцій і процесів в аналітичній хімії

Основні типи реакцій і процесів в аналітичній хімії. Стан речовин в ідеальних і реальних системах. Закон діючих мас. Константи рівноваги в гомогенних та гетерогенних системах. Протолітична теорія Бренстеда – Лоурі. Константа автопротолізу. Буферні розчини та їх властивості. Обчислення рН розчинів. Добуток розчинності. Окисно-відновний потенціал. Рівняння Нернста. Константи стійкості комплексних сполук.

3.2. Методи виявлення та ідентифікації іонів

Аналітична реакція та аналітичний ефект. Вимоги та умови виконання аналітичних реакцій. Дробний і систематичний аналіз. Групові реагенти.

3.3. Хімічні методи аналізу

Титриметричний метод аналізу. Класифікація методів за типами хімічних реакцій. Вимоги до реакції в титриметричному аналізі. Види титриметричного визначення. Способи вираження концентрації розчинів в титриметрії. Первинні та вторинні стандарти. Точка стехіометричності і кінцева точка титрування. Загальні правила вибору індикатору та побудови кривих титрування. Фактори, які впливають на стрибок кривої титрування.

Метод кислотно-основного титрування: ацидиметрія та алкаліметрія. Методи окислювально-відновного титрування: перманганометрія, йодометрія, дихроматометрія. Методи комплексометричного титрування. Металохромні індикатори і вимоги до них. Комплексонометрія. Методи осаджувального титрування. Аргентометрія. Методи Фольгарда, Мора, Фаянса.

Гравіметричний метод аналізу. Сутність гравіметричного аналізу і межі його застосування. Прямі і непрямі методи визначення. Гравіметричний фактор. Вимоги до осаджувальної та гравіметричної форми.

3.4. Методи розділення та концентрування

Класифікація методів розділення та концентрування. Сорбція. Переваги сорбційного концентрування. Класифікація механізмів сорбції. Ізотерми сорбції. Види сорбентів. Екстракція. Класифікація екстраційних систем та процесів. Умови екстракції неорганічних і органічних сполук. Константа екстракції та коефіцієнт розподілу. Хроматографія. Класифікація хроматографічних методів. Основні етапи хроматографічного аналізу. Іонний обмін і іонообмінна хроматографія. Тонкошарова та паперова хроматографія.

3.5. Інструментальні методи аналізу

Молекулярна спектроскопія. Спектри поглинання в УФ- та видимій області, їх основні характеристики, використання для якісного та кількісного аналізу. Типи електронних переходів. Закон Бугера – Ламберта – Бера. Молярний коефіцієнт світлопоглинання, його фізичний зміст. Спектрофотометричний метод. Реакції, які використовуються в фотометрії. Вибір оптимальних умов їх проведення. Способи визначення концентрацій речовин. Люмінесцентний аналіз. Правило дзеркальної симетрії. Інфрачервона спектроскопія. Типи коливань. Застосування ІЧ-спектроскопії для ідентифікації сполук.

Атомна спектроскопія. Джерела атомізації і збудження. Фізичні і хімічні процеси в джерелах атомізації. Метрологічні характеристики спектрального аналізу. Атомно-емісійний аналіз. Якісний і кількісний аналіз. Кількісна залежність між інтенсивністю спектральних ліній і концентрацією.

Атомно-абсорбційний метод. Сутність методу, способи отримання поглинаючого шару атомів. Умови Уолша. Джерела випромінювання, їх характеристики. Типи атомізаторів та їх конструктивні особливості. Спектроскопічні величини, зв'язок між цими величинами і концентрацією елементу в пробі. Можливості, переваги і недоліки методу, порівняння його з атомно-емісійним методом.

Електрохімічні методи аналізу. Загальна характеристика електрохімічних методів. Класифікація. Види електрохімічних потенціалів і причини їх виникнення на межі розподілу різних фаз. Електрохімічна комірка. Гальванічний елемент. Типи електродів. Чутливість і селективність електрохімічних методів.

Потенціометрія. Вимірювання потенціалу. Іонометрія. Класифікація електродів. Електродна функція, коефіцієнт селективності, час відгуку. Потенціометричне титрування. Зміна електродного потенціалу в процесі титрування. Способи виявлення кінцевої точки титрування.

Кулонометрія. Закони Фарадея. Способи визначення кількості електрики. Пряма кулонометрія. Потенціостатична та амперостатична кулонометрія. Титрування електроактивних і електроінертних компонентів. Визначення кінцевої точки титрування.

Вольтамперометрія та амперметричне титрування. Індикаторні електроди і класифікація вольтамперметричних методів. Переваги і недоліки ртутного електроду. Одержання і характеристика вольтамперної кривої. Полярнографія. Рівняння Ільковича. Рівняння полярографічної хвилі Ільковича – Гейровського. Потенціал півхвилі. Амперметричне

титрування. Суть методу. Індикаторні електроди. Амперометричне титрування з одним і двома індикаторними поляризованими електродами. Види кривих титрування.

Кондуктометрія. Електропровідність розчинів. Кондуктометрична комірка. Принцип кондуктометричного титрування.

3.6. Метрологічні основи хімічного аналізу

Основні метрологічні характеристики (правильність, відтворюваність). Особливості хімічного аналізу як процесу вимірювання. Похибки вимірювань. Статистичні критерії перевірки правильності та відтворюваності результатів. Стандартні зразки.

4. Органічна хімія

4.1. Загальні положення теоретичної органічної хімії. Теорія будови органічних сполук О.М.Бутлерова. Типи хімічного зв'язку (іонний, ковалентний, семіполярний, водневий). Гібридизація атомних орбіталей, ковалентні σ - та π -зв'язки.

4.2. Класифікація органічних сполук, реагентів і реакцій. Принципи номенклатури насичених та ненасичених вуглеводнів, вуглеводневих радикалів. Ізомерія органічних сполук (структурна, геометрична, оптична та поворотна ізомерія). Поняття про типи механізмів реакцій в органічній хімії.

4.3. Методи виділення, очистки та ідентифікації органічних сполук. Способи розділення органічних речовин: фільтрування, центрифугування, перекристалізація, возгонка та ректифікація, перегонка з водяною парою, екстракція. Колоночна, тонкошарова і газова хроматографія, їх використання для розділення та ідентифікації органічних сполук.

4.4. Фізичні константи органічних сполук (температури плавлення й кипіння, густина, показник заломлення, молекулярна рефракція), їх сутність, методи визначення та використання для ідентифікації.

4.5. Сучасні інструментальні методи ідентифікації органічних сполук: ІЧ, УФ, ЯМР спектроскопія, їх сутність і основні параметри, що використовуються для ідентифікації органічних речовин.

4.6. Основні класи органічних сполук. Алкани. Номенклатура, ізомерія алканів, електронна та просторова будова алканів. Основні методи синтезу алканів. Хімічні властивості алканів. Вільні радикали та фактори, що визначають їх відносну стабільність. Механізми вільнорадикальних реакцій в алканах. Реакційна здатність та вибірковість (регіоселективність) при реакціях радикального заміщення.

Алкени, алкіни, алкадієни. Номенклатура, ізомерія, електронна та просторова будова ненасичених вуглеводнів. Методи синтезу алкенів, алкінів, алкадієнів. Хімічні властивості алкенів, алкінів, алкадієнів. Механізм електрофільного приєднання, регіо- та стереоселективність реакцій A_E . Правило Марковникова та його сучасна інтерпретація. Обернення орієнтації приєднання бромоводню (за Карашем). 1,2- та 1,4-приєднання до кон'югованих алкадієнів. Кислотні властивості термінальних ацетиленів.

Ароматичні сполуки. Номенклатура, ізомерія ароматичних сполук. Електронна будова бензольного кільця. Поняття про ароматичність, правило Хюккеля, енергія кон'югації та ступінь ароматичності. Методи синтезу бензолу та його гомологів. Хімічні властивості аренів і реакції електрофільного заміщення. Вплив замісників в бензольному кільці на ізомерний склад продуктів і швидкість реакції.

Галогенопохідні вуглеводнів. Моногалогенопохідні аліфатичного та ароматичного рядів, їх номенклатура, ізомерія та електронна будова. Способи утворення зв'язку $C-Hal$. Хімічні властивості моногалогенопохідних: нуклеофільне заміщення атомів галогенів і дегідрогалогенування. Особливості механізмів S_N1 та S_N2 . Конкуренція реакцій нуклеофільного заміщення (S_N1 та S_N2) та елімінування ($E1$ та $E2$).

Спирти та феноли. Одноатомні та багатоатомні спирти і феноли, їх номенклатура, ізомерія та електронна будова. Способи одержання гідроксипохідних аліфатичного та ароматичного рядів. Хімічні властивості спиртів та фенолів.

Карбонільні сполуки. Електронна будова карбонільної групи. Альдегіди, кетони, їх

номенклатура та ізомерія. Способи утворення карбонільної групи. Хімічні властивості альдегідів та кетонів. Нуклеофільне приєднання по карбонільній групі та його механізм. Класифікація нуклеофільних реагентів: основи Льюїса, псевдокислоти, криптооснови. Кетосольна та таутомерія.

Карбонові кислоти та їх похідні. Класифікація, номенклатура, ізомерія карбонових кислот та їх похідних. Електронна будова карбоксильної групи та карбоксилат-аніона. Методи одержання карбонових кислот. Хімічні властивості карбонових кислот. Похідні карбонових кислот: естери, галогенангідриди, ангідриди, амідни, нітрили. Уявлення про механізм взаємоперетворень карбонових кислот та їх похідних, роль кислотного та основного каталізів на прикладі реакцій естерифікації та омилення.

Нітросполуки. Способи одержання та хімічні властивості нітросполук. Нітросполуки, класифікація, номенклатура, ізомерія та електронна будова нітрогрупи. Способи одержання нітросполук. Хімічні властивості нітросполук: Таутомерія нітросполук.

Аміни. Класифікація, ізомерія, номенклатура амінів. Електронна будова аміногрупи, просторова будова амінів. Способи синтезу амінів. Хімічні властивості амінів. Діазо- і азосполуки. Електронна будова та реакції солей діазонію. Загальні уявлення про механізм реакції азосполучення.

Гідроксикислоти. Класифікація, ізомерія, номенклатура гідроксикислот. Уявлення про стереохімію гідроксикислот з одним та двома хіральними центрами (молочна, яблучна та винна кислоти). Загальні методи синтезу гідроксикислот. Хімічні властивості гідроксикислот.

Амінокислоти. Класифікація і номенклатура амінокислот. Структурні типи природних амінокислот, стереохімія і конфігураційні ряди. Методи синтезу амінокислот, оснований на реакціях ненасичених і дикарбонових кислот. Хімічні властивості амінокислот. Уявлення про пептидний синтез.

Вуглеводи. Класифікація і номенклатура вуглеводів. Стереοізомерія моносахаридів, конфігураційні ряди, кільчасто-ланцюгова таутомерія, реакції, які використовуються для доказу наявності та розміру циклу. Мутаротація. Хімічні властивості моносахаридів. Класифікація, будова, номенклатура, дисахаридів. Цикло-оксо-таутомерія відновних дисахаридів і властивості, пов'язані з нею.

Гетероциклічні сполуки. П'ятичленні гетероцикли з одним гетероатомом (фуран, тіофен, пірол), їх будова, залежність ступеня ароматичності від природи гетероатома. Загальні методи синтезу. Хімічні властивості п'ятичленних гетероциклів, реакції електрофільного заміщення і вплив природи гетероатома на особливості їх протікання.

Шестичленні гетероцикли з одним гетероатомом. Піридин, номенклатура та ізомерія похідних. Електронна будова піридину та її зв'язок з хімічними властивостями. Реакції електрофільного заміщення в ядрі піридину. Реакції нуклеофільного заміщення, механізм реакції Чичибабіна.

4.7. Високомолекулярні сполуки. Класифікація полімерів в залежності від походження, хімічного складу та будови ланок основного ланцюга.

Процеси полімеризації, радикально-ланцюгова полімеризація. Процеси ініціювання, типи ініціаторів. Засоби проведення радикальної полімеризації: в масі, емульсії, суспензії; їх переваги та недоліки.

Загальна характеристика процесів поліконденсації, їх класифікація, види рівноваг. Рівновага лінійна поліконденсація - утворення циклів; вплив температури.

Властивості розчинів полімерів, процеси набування, термодинаміка цих процесів. Основне рівняння стану полімерів в розчинах, його аналіз. Віскозиметрія як метод визначення молекулярних мас полімерів.

Характеристика агрегатних і фазових станів полімерів, кристалічний фазовий стан, теплові ефекти фазових переходів, типи надмолекулярних структур. Фізичні стани полімерів, термомеханічні криві аморфних полімерів, вплив молекулярних мас.

5. Фізична хімія

5.1. Основні етапи розвитку фізичної хімії як сучасної теоретичної основи хімії. Основи хімічної термодинаміки. Інтенсивні та екстенсивні параметри системи.

5.2. Термодинамічні процеси, їх види. Перший закон термодинаміки. Теплоємність речовин. Ентальпія. Закон Гесса та висновки з нього. Залежність теплоємності від температури та розрахунки теплових ефектів реакцій. Застосування першого закону термодинаміки.

5.3. Другий закон термодинаміки. Рівняння другого закону термодинаміки для зворотних та незворотних процесів. Самодовільні процеси. Ентропія як функція стану системи. Фізичний зміст ентропії. Третій закон термодинаміки. Розрахунок абсолютного значення ентропії. Застосування другого закону термодинаміки.

5.4. Характеристичні функції та їх значення. Зв'язок між зміною вільної енергії та роботою системи. Величини характеристичних функцій як критерії умов рівноваги та самодовільного перебігу хімічних процесів. Рівняння Гіббса-Гельмгольца та його роль в хімії. Хімічний потенціал ідеального та неідеального газів. Умови рівноваги та самодовільного перебігу процесів у відкритих системах.

5.5. Хімічна рівновага. Рівняння ізотерми хімічної реакції. Зміна енергії Гіббса та енергії Гельмгольца при хімічній реакції. Розрахунок констант рівноваги хімічних реакцій з використанням таблиць стандартних величин термодинамічних функцій. Залежність константи рівноваги від температури. Рівняння ізобари та ізохори хімічної реакції.

5.6. Фазові рівноваги. Гетерогенні хімічні рівноваги та особливості їх термодинамічного описання. Рівновага фаз. Правило фаз Гіббса. Рівняння Клапейрона-Клаузіуса та його застосування до різних фазових переходів. Діаграми стану однокомпонентних систем: сірки, вуглецю, води. Фізико-хімічний аналіз. Діаграми стану двохкомпонентних систем.

5.7. Рідкий стан речовини, його природа. Поверхневий натяг, його залежність від температури та густини. Розчини. Теплові та об'ємні ефекти при утворенні розчинів. Механізм розчинення. Розчинність газів в рідинах. Розбавлені розчини неелектролітів, їх властивості. Ідеальні та неідеальні розчини. Тиск насиченої пари рідких розчинів. Відхилення від закону Рауля.

5.8. Рівновага рідина-пар в двокомпонентних системах. Склад насиченої пари рідких сумішей. Закони Коновалова. Поділення речовин шляхом перегонки. Дистиляція подвійних сумішей. Азеотропні суміші та їх властивості.

5.9. Неідеальні розчини та їх властивості. Температура кипіння та замерзання розчинів. Кріоскопія та ебуліоскопія. Процеси, що мають місце в розчинах: дифузія, осмос.

5.10. Розчини електролітів. Застосування законів Рауля та Вант-Гоффа для розчинів електролітів. Основні положення та недоліки теорії електролітичної дисоціації Арреніуса. Причини електролітичної дисоціації. Константа електролітичної дисоціації, закон розведення Оствальда.

5.11. Основні положення та недоліки теорії Дебая-Хюккеля. Активність і коефіцієнт активності електролітів. Іонна сила розчину. Правило сталості іонної сили. Перше, друге та третє наближення Дебая-Хюккеля.

5.12. Електропровідність розчинів електролітів. Питома та молярна електрична провідність розчинів слабких та сильних електролітів та її залежність від концентрації. Числа переносу та методи їх визначення.

5.13. Закон незалежного руху іонів Кольрауша. Теорія електропровідності сильних електролітів Дебая-Хюккеля-Онзагера. Електрофоретичний і релаксаційний ефекти. Протонний механізм переносу електрики в розчинах електролітів. Кондуктометричне титрування.

5.14. Гальванічний елемент. Електродний, дифузійний та контактний потенціали. Класифікація електродів. Типи електрохімічних ланцюгів. Термодинаміка гальванічного елемента. Потенціометричне титрування.

5.15. Швидкість електрохімічної реакції. Поляризація електродів. Перенапряга. Швидкість реакції перенесення заряду. Рівняння Тафеля.

5.16. Корозія. Класифікація процесів корозії. Швидкість корозії. Механізми електрохімічної та хімічної корозії. Захист від корозії.

5.17. Електричні характеристики хімічних джерел струму. Первинні та вторинні електрохімічні системи. Паливні елементи.

5.18. Формальна хімічна кінетика. Кінетика простих реакцій. Кінетичні рівняння. Методи визначення порядку реакції. Складні реакції (послідовні, паралельні, оборотні). Принцип незалежності елементарних стадій. Кінетичні криві накопичення окремих продуктів та визначення констант швидкості. Фотохімічні реакції. Закон фотохімічної еквівалентності Штарка-Ейнштейна. Вплив температури на швидкість хімічної реакції. Енергія активації. Рівняння Арреніуса. Основні теорії хімічної кінетики: теорія активних зіткнень та теорія перехідного стану.

5.19. Каталіз. Каталітичні реакції, їх особливості. Активність та селективність каталізаторів. Основні промислові каталітичні процеси. Механізми каталітичних процесів. Кінетика гомогенних каталітичних реакцій. Гетерогенні каталітичні реакції. Стадії гетерогенних каталітичних процесів. Активована адсорбція. Кінетична та дифузійна області гетерогенно-каталітичного процесу. Загальні уявлені про ферментативний каталіз.

6. Колоїдна хімія

6.1. Теоретичні та експериментальні основи колоїдної хімії – самостійної області хімічної науки. Різні типи класифікації дисперсних систем: за агрегатним станом дисперсної фази та дисперсійного середовища, за розміром частинок, за концентрацією та ін.

6.2. Особливості ліофобних та ліофільних колоїдних розчинів, їх відмінність від розчинів високомолекулярних сполук. Головні нові напрямки та об'єкти (мікроемульсії, тонкі плівки, біоколоїди та ін.), які вивчаються колоїдною хімією

6.3. Теорія броунівського руху. Її переконливе обґрунтування правильного матеріалістичного світогляду, що привело до утворення теорії флуктуації та сприяло розвитку статистичної фізики

6.4. Методи одержання дисперсних систем. Основні положення при розгляданні термодинаміки утворення нової фази

6.5. Фізична та хімічна основа й суть процесу адсорбції на різних межах поділу фаз

6.6. Особливі властивості поверхневих шарів, поверхневих явищ і утворення поверхневих плівок в дисперсних системах

6.7. Основні теорії адсорбції та енергетичні параметри адсорбції

6.8. Поверхнево-активні речовини (ПАР) і особливості їх адсорбції. Визначення розмірів і форми молекул ПАР, які утворюють поверхневу плівку

6.9. Особливі електричні властивості дисперсних систем. Вплив різних факторів (концентрації електролітів, температури та інших) на величину і знак електростатичного потенціалу колоїдних частинок

6.10. Змочування і розтікання. Крайовий кут змочування. Закон Юнга. Співвідношення між роботами когезії та адгезії при змочуванні. Рівняння Дюпре. Вибірче змочування як метод характеристики поверхні твердих тіл (ліофільних та ліофобних). Флотація.

6.11. Кількісна теорія кінетики коагуляції, яка була розвита в трудах Смолуховського, Мюллера і Фукса і обґрунтування відстані, на яку повинні наблизитися частинки, щоб відбулася їх взаємодія

6.12. Структуроутворення в дисперсних системах. Природа контактів між елементами структур. Умови утворення, механічні властивості коагуляційних структур; явище тиксотропії; утворення та властивості гелів

6.13. Колоїдно-хімічні основи охорони навколишнього середовища. Методи очистки природних та стічних вод, які засновані на зміні агрегативної та седиментаційної стійкості дисперсних систем. Використання коагулянтів і флокулянтів для очистки води. Очистка води від ПАР та іонів важких металів. Використання пінного фракціонування та піночної флотації, адсорбції та іонного обміну

6.14. Емпіричні закономірності та рівняння (Бірона, Гульдберга, Трутона, Коппа), які характеризують рідкий стан речовини. Сучасні дослідження будови води: аналіз моделі води (агрегату з молекул води) за допомогою ЕВМ; аналіз радіальних функцій розподілу рідкої води. Структура води в тонкому шарі на межі поділу фаз вода-газ

6.15. Сучасні уявлення про природу гідрофобної взаємодії. Гідрофобна взаємодія в дисперсних системах. Гідрофобна взаємодія в адсорбційному шарі та механізм адсорбції із розчинів з точки зору уявлень про гідрофобну взаємодію

6.16. Колоїдно-хімічні закономірності міжфазних взаємодій ПАР в багатокомпонентних системах в умовах існування та виникнення фазових утворень (супрамолекулярних асоціатів, наноструктурних утворень із контрольованими колоїдно-хімічними властивостями)

6.17. Поверхнева активність та адсорбція колоїдних ПАР. Гідрофільно-ліпофільний баланс. Гідрофільно-ліпофільне, гідрофільно-олеофільне та адсорбційно-міцелярне енергетичне співвідношення. Міцелоутворення у розчинах ПАР. Будова прямих та обернених міцел при різних концентраціях ПАР

6.18. Явища сольобілізації (колоїдне розчинення органічних речовин в прямих міцелах). Сольобілізація в неводних середовищах. Зв'язування і міцелярний каталіз.

7. Металоорганічна хімія

7.1. Зв'язок метал-карбон як основна характеристика металоорганічних сполук: ступінь йонності і ковалентності зв'язків С-М і їх вплив на будову і реакційну здатність металоорганічних сполук. Вплив поляризації органічних фрагментів і поляризації металу на структуру сполук. σ -Ліганди, ліганди π -донорного і π -акцепторного типів, їх класифікація і номенклатура.

7.2. Основні синтетичні підходи до одержання металоорганічних сполук неперехідних металів, їх хімічні властивості, застосування.

7.3. Металоорганічні сполуки перехідних металів. Правило 18-ти валентних електронів. Класифікація металоорганічних сполук перехідних металів за типом лігандів. σ -Донорні ліганди: взаємодія σ -зв'язків С-Н, С-С з перехідними металами. σ -Донорні- π -акцепторні ліганди. Алкєнільні, арильні, алкінільні, карбєнові, карбінові комплекси. σ, π -Донорні- π -акцепторні ліганди. Алкєнові, алленові, алкінові комплекси. Комплекси циклічних π -лігандів. Циклопєнтадієнільні та бензолні комплекси.

8. Супрамолекулярна хімія

8.1. Становлення та розвиток супрамолекулярної хімії. Об'єкти та компоненти супрамолекулярних систем. Основні функції супрамолекул.

8.2. Природа супрамолекулярних взаємодій: координаційні, іон-іонні, іон-дипольні, диполь-дипольні, водневі, катіон- π , π - π -стекінг, ван-дер-ваальсові.

8.3. Основні класи лігандів-рецепторів. Поданди. Краун-етери. Криптанди. Циклодекстрини. Сферанди. Кавітанди. Карцеранди. Гетерокраун-естери. Каліксарени.

8.4. Супрамолекули. Комплекси типу «хазяїн-гість». Хелатний та макроциклічний ефекти. Катенани. Ротоксани.

8.5. Супрамолекулярні ансамблі. Міцели, везікули, мембрани, рідкі кристали. Тверді сполуки включення. Клатрати та інтеркаляти.

9. Нанохімія

9.1. Основні класи нанорозмірних систем. Карбонові наноструктури (фулерени і нанотубки). Компактні наноструктуровані матеріали. Порошкові наноматеріали. Наноматеріали на основі органічних речовин. Квантові наноструктури різної розмірності.

9.2. Фізичні та хімічні методи синтезу нанопорошків. Компактування порошків. Плівкові технології. Темплатний синтез наноматеріалів і наноструктур. Золь-гель метод та його модифікації.

9.3. Біологічні наноматеріали. Приклади наноструктур в живих організмах. Кістки та біологічні нанокompозити.

9.4. Методи дослідження нанорозмірних систем: мікроскопічні, спектроскопічні, дифракційні.

9.5. Фізико-хімічні особливості наноструктурованих матеріалів. Енергетичний стан поверхні. Термодинамічні функції поверхні. Кінетичні особливості протікання хімічних процесів на поверхні наночастинок. Термодинамічні та кінетичні особливості поведінки наночастинок. Нанокаталіз.

9.6. Розмірні ефекти. Вплив розміру частинок на особливості їх хімічних властивостей і реакційну здатність. Проблеми стійкості наночастинок і їх асоціатів; фактори, що обумовлюють стабільність.

9.7. Фізичні особливості нанооб'єктів. Напівпровідникові наноматеріали. Нанокompозитні матеріали. Загальні методи отримання нанокompозитів. Магнітні наноматеріали.

2. КРИТЕРІЇ ОЦІНЮВАННЯ ЗНАТЬ

Оцінювання знань вступників до аспірантури із спеціальності «102 Хімія» виставляється відповідно до основних критеріїв та показників рівня знань.

Згідно з Правилами прийому до аспірантури, результати складання вступних іспитів оцінюються за 100-бальною шкалою:

- ✓ 0-59 балів - незадовільно;
- ✓ 60-74 бали - задовільно;
- ✓ 75-89 балів - добре;
- ✓ 90-100 балів - відмінно.

Відповідь вступника оцінюється на „**відмінно**”(90 – 100 балів), якщо вона містить повне, розгорнуте, правильне та обґрунтоване викладення матеріалу; відображає чітке знання відповідних категорій, їх змісту, розуміння їх взаємозв'язку і взаємодії, правильне формулювання тлумачень відповідних понять; демонструє знання різних поглядів щодо наукової проблеми; вміння використовувати теоретичні знання для розв'язання дослідницьких та практичних завдань у складних та невизначених умовах; містить аналіз змістовного матеріалу, самостійні висновки вступника, формулювання та аргументацію його точки зору, яка логічно і граматично правильно викладена.

Відповідь вступника оцінюється на „**добре**”(75 – 89 балів), якщо вона якщо вона містить повне, правильне та обґрунтоване викладення матеріалу; відображає знання відповідних категорій, їх змісту, розуміння їх взаємозв'язку і взаємодії, правильне формулювання тлумачень відповідних понять; уміння використовувати теоретичні знання для розв'язання дослідницьких та практичних завдань у конкретних умовах; при цьому не містить самостійного аналізу питання; або містить незначні неточності, які не впливають істотно на загальну характеристику того чи іншого явища (процесу тощо).

Відповідь вступника оцінюється на „**задовільно**”(60 -74), якщо вона є неповною, не містить усіх необхідних відомостей про предмет питання, є не зовсім правильною: наявні недоліки у розкритті змісту понять, категорій, закономірностей; не є аргументованою; викладена з істотним порушенням логіки подання матеріалу; містить багато теоретичних

помилки; свідчить про наявність прогалин у знаннях вступника, який зазнає труднощів у використанні теоретичних знань для розв'язання дослідницьких та практичних завдань у конкретних умовах.

Відповідь вступника оцінюється на „незадовільно”(0-59 балів), якщо вступник не відповів на поставлене запитання, або відповідь є неправильною, не розкриває сутності питання, або допущені грубі змістовні помилки, які свідчать про відсутність знань у вступника, або їх безсистемність та поверховість, невміння сформулювати думку та викласти її, незнання основних положень навчальної дисципліни, відсутність уміння використовувати теоретичні знання для розв'язання дослідницьких та практичних завдань у конкретних умовах.

3. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА ТА ІНФОРМАЦІЙНІ РЕСУРСИ

1. Загальна хімія : навчальний посібник / Ракитська Т.Л. – Одеса: ОНУ імені І.І. Мечникова, 2019. – 291 с.
2. Общая и неорганическая химия. Учебник для вузов: в 2-х т. / Под ред. А.Ф. Воробьева. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2004.
3. Неорганическая химия: в 3-х т. / Под ред. Ю.Д. Третьякова. – М.: Издательский центр «Академия», 2004.
4. Григор'єва В.В., Самійленко В.М., Сич А.М. Загальна хімія. – Київ: Вища школа, 1991. – 431 с.
5. Степаненко О.М., Рейтер Л.Г., Ледовських В.М., Іванов С.В. Загальна та неорганічна хімія. У 2-х частинах. Ч. 2. – Київ: Пед. преса, 2000. – 784 с.
6. Рейтер Л.Г. Теоретичні розділи загальної хімії: Навчальний посібник. – Київ: Каравела, 2003. – 352 с.
7. Яворський В.Т. Неорганічна хімія: підручник. – Львів: Видавництво Львівської політехніки, 2016. – 324 с.
8. Романова Н.В. Загальна та неорганічна хімія: Підручн. – Київ, Ірпінь: ВТФ Перун, 2004. – 480 с.
9. Глинка Н.Л. Общая химия: учебное пособие. – М.: КноРус, 2009. – 732 с.
10. Неділько С.А., Попель П.П. Загальна й неорганічна хімія : Задачі та вправи: Навч. посібник для студ. хім. спец. вищих навч. закл. К. : Либідь, 2001.
11. Малиновський В.В. Неорганічна хімія. Навч. Посібник. Київ. КНТЕУ. 2003. С. 184.
12. Загальна хімія : теорія і задачі : Навч. посібник. Ч. 1 / Л. Б. Цветкова. - Л. : Магнолія-2006, 2007. - 398 с.
13. Цветкова Л.Б. Неорганічна хімія: теорія і задачі: навч. посіб. Львів. «Магнолія 2006». 2018. С. 412.
14. Кельнер Р., Мерме Ж. и др. (ред.) Аналитическая химия. Проблемы и подходы.– М: Мир, 2004. Том 1. – 608 с.; Том 2. – 768 с.
15. Золотов Ю.А. (ред.) Основы аналитической химии. Том 1. Общие вопросы. Методы разделения. Учебник для вузов в 2-х томах. - М.: Высшая школа, 2002. – 351 с.
16. Золотов Ю.А. (ред.) и др. Основы аналитической химии. Кн. 2: Методы химического анализа. Учебник для вузов в 2-х томах. - М.: Высшая школа, 2002. – 494 с.
17. Васильев В. П. Аналитическая химия. В 2-х кн. Кн. 2. Физико- химические методы анализа: учеб. – М.: Дрофа, 2002. – 384 с.
18. Москвин Л.Н., Родинков О.В. Методы разделения и концентрирования в аналитической химии: учебник. – 2 изд. Долгопрудный: Издательский дом «Интеллект», 2012. – 352 с.
19. Зінчук В.К., Левицька Г.Д., Дубенська Л.О. Фізико-хімічні методи аналізу: Навчальний посібник. – Львів: Видавничий центр ЛНУ імені Івана Франка, 2008. – 362 с.
20. Тимошук О.С., Тимошук С.В., Врублевська Т.Я., Пацай І.О. Основи електроаналітичної хімії: навчальний посібник. – Львів: Видавничий центр ЛНУ імені Івана Франка, 2018. – 438 с.

21. Левицька Г.Д., Дубенська Л.О. Електрохімічні методи аналізу: навчальний посібник. – Львів: Видавничий центр ЛНУ імені Івана Франка, 2011. – 273 с.
22. Чеботарьов О.М., Топоров С.В., Гузенко О.М., Рахлицька О.М. Теоретичні основи аналітичної хімії. Розрахунки хімічної рівноваги : Навчально-методичний посібник для студентів II курсу факультету хімії та фармації спеціальності «102 Хімія» рівня вищої освіти першого (бакалаврського). – Вид. 2-ге, доповнене. – Одеса : «Одес. нац. ун-т ім. І. І. Мечникова», 2019. – 112 с.
23. Топоров С.В., Хома Р.Є. Аналітична хімія. Фізико-хімічні методи аналізу. Ч. I. Електрохімічні методи аналізу : методичний посібник для самостійної роботи студентів хімічного факультету Одеса : «Одес. нац. ун-т ім. І. І. Мечникова», 2016. – 76 с.
24. Чеботарьов О.М., Топоров С.В. Аналітична хімія. Фізико-хімічні методи аналізу. Ч. II. Оптичні методи аналізу: методичний посібник для самостійної роботи студентів хімічного факультету Одеса : «Одес. нац. ун-т ім. І. І. Мечникова», 2017. – 92 с.
25. Чеботарьов О.М., Снігур Д.В. Метрологічні основи хімічного аналізу : Підручник., Одеса: ОНУ, 2019. – 229 с.
26. Черних В.П., Зіменковський Б.С., Гриценко І.С. Органічна хімія. Підруч. для студ. вищ. навч. зают. / За заг. ред. В.П. Черних. — 2 вид., випр. і доп. - Х: Вид-во НФаУ; Оригінал, 2008. — 752 с
27. Бобрівник Л.Д., Руденко В.М., Лезенко Г.О. Органічна хімія. – К.:Перун, 2005. – 544 с.
28. Реутов О.А., Курц А.Л., Бутин К.П. Органическая химия. Учебник в 4 томах / М: «Бином, Лаборатория знаний», 2018. – 2/624с, 4/726 с
29. Смит М. Органическая химия Марча. Реакции, механизмы, строение. В 4-х томах М: «Бином, Лаборатория знаний», 2019. – 1/464 с
30. Терней А.Л. Современная органическая химия Т. 1, 2. М: Мир, 1981. – 678 с. (1), 652 с (2).
31. Яцимирський В.К. Фізична хімія. - Київ: Перун, 2007. - 512 с.
32. Гомонай В., Гомонай О. Фізична хімія. Ч.1. Хімічна термодинаміка.- Ужгород: Мистецька лінія. - 2000. - 289 с.
33. Гомонай В., Гомонай О. Фізична хімія. Ч. 2. Хімічна кінетика. Каталітичні реакції. Фізико-хімія поверхневих явищ. Фото- та радіаційно-хімічні процеси. Електрохімія. - Ужгород: Мистецька лінія. - 2003. - 477 с.
34. Лебідь В.І. Фізична хімія. - Харків: Фоліо, 2005. - 478 с.
35. Чумак В.Л., Іванов С.В. Фізична хімія. – К.: Книжкове вид-во НАУ, 2007. - 648 с.
36. Ковальчук Є.П., Решетняк О.В. Фізична хімія : Підручник. – Львів : Вид. центр ЛНУ імені Івана Франка, 2007. – 800 с.
37. Стромберг А. Г., Семченко Д. П. Физическая химия. - 4-е изд. – М.: Высш. шк., 2001. - 527с.
38. Щукин Е.Д., Перцов А.В., Амелина Е.А. Коллоидная химия. - М.: Высш. шк., 2007. - 444 с.
39. Фролов Ю.Г. Курс коллоидной химии. - М.: Химия, 1989. - 462 с.
40. Фридрихсберг Д.А. Курс коллоидной химии. - Л.: Химия, 1995. - 385 с.
41. Колоїдна хімія: Підручник/ М.О. Мchedlov-Петросян, В.І. Лебідь, О.М. Глазкова, С.В. Єльцов, О.М. Дубина, В.Г. Панченко; За ред. М.О. Мchedlova-Петросяна – Харків: Фоліо, 2005. – 304 с.
42. Мchedlov-Петросян М. О. Колоїдна хімія : підручник. / М. О. Мchedlov-Петросян, В. І. Лебідь, О. М. Глазкова та ін. – Х.: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2010.
43. Сумм Б. Основы коллоидной химии: учебное пособие для студентов высших учебных заведений. – Учебник и учеб. пособ. для высшей школы. - М.: Академия ИЦ, 2009. - 239 с.
44. Волков В. А. Коллоидная химия. Поверхностные явления и дисперсные системы / В. А. Волков. – СПб. : Лань, 2015.
45. Эльшенбройх К. Металлоорганическая химия / К. Эльшенбройх; пер. с нем. - 2-е изд. (эл.). — М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. — 746 с.
46. Основы химии и технологии элементо-органических соединений: Учебное пособие. Скворцов Н.К. – С-Пб.: СПбГТИ(ТУ), – 2010. – 88 с.

47. Сейфулліна І.Й., Громова М.І. Сучасні проблеми металоорганічної хімії. – Одеса: Одес. нац. ун-т ім. І. І. Мечникова, 2019. – 146 с.
48. Марцинко О.Е. Супрамолекулярна хімія. – Одеса: Одес. нац. ун-т ім. І. І. Мечникова, 2019. – 120 с.
49. Супрамолекулярная химия. Пер. с англ.: в 2 т. / Дж. В. Стивд, Дж. Л. Этвуд. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2007.
50. Прикладна супрамолекулярна хімія. / В.І. Рибаченко, Богуміл Бжезінські, Л.І. Опейда Та ін.- Донецьк, ТОВ «Юго-Восток, Лтд», 2005. -268 с.
51. Сергеев Г.Б. Нанохимия / Г. Б. Сергеев. – М.: Из-во МГУ, 2007. – 336 с.