辽宁大学2021年招收攻读博士学位研究生(普通招考方式)

初试科目考试大纲

科目代码：3082

科目名称：高等无机化学

满分：100分

**一、对称性与群论基础**

**目标和要求：**

1. 理解对称性的自然属性，掌握对称元素和对称操作的概念，熟记其符号表示。要求能熟练写出正四面体和正八面体的全部对称元素和对称操作。
2. 理解群和点群的概念，掌握常见点群的基本特性。要求学会已知分子构型正确判定其所属点群；已知点群能画出分子构型实例。
3. 理解共轭对称元素和共轭对称操作的定义；理解和掌握特征标的定义、计算和同类操作特征标相同原理，理解特征标的几何意义。要求对已知分子构型会选择恰当坐标系求出可约表示特征标。
4. 理解可约表示和不可约表示的概念，理解和掌握特征标表中符号含义和特征标表的性质。要求学会熟练应用求系数公式约化可约表示。
5. 理解和掌握应用群论处理化学若干结构理论问题的基本思路和方法。要求学会对一些简单分子体系的群论处理。

**重点和难点：**

重点是理解和掌握不可约表示特征标表及其与化学分子结构和能级的关系；难点是理解和掌握对称性-群论基本原理的数学基础及其在化学结构理论中的应用方法。

**二、原子的电子结构与性质**

**目标和要求：**

1. 理解和掌握原子的组成及相关概念；理解微观粒子的波粒二象性，理解和掌握氢原子的电子结构和空间量子化特性；理解量子力学基本假设；理解和掌握中心场近似模型与周期表原子的壳层电子填充规则和基态电子组态，学会用电子结构解释元素周期性。

2. 理解原子中电子轨道-轨道、自旋-自旋和自旋-轨道运动耦合的物理意义，掌握原子光谱项能级和简并度的概念；理解光谱项的推引原则，并学会简单组态光谱项的推引；熟练掌握由已知光谱项推引其光谱支项；能熟练写出谱项简并度和波函数；能根据洪德规则判定基态光谱项和基态支项。

3. 理解原子全同电子波函数的交换反对称性质；理解谱项波函数的单电子展开和谱项能量的计算思路，了解计算过程；理解旋-轨耦合能量的来源和计算方法，掌握旋-轨耦合常数的概念；理解原子轨道磁矩、自旋磁矩和旋轨耦合磁矩的产生根源及相互关系，掌握计算方法。

4. 理解原子结构的稳定性和化学活性的关系，理解和掌握泡利原理对原子结构和分子结构乃至物质结构的决定性作用，掌握原子间相互作用形成离子键、共价键、金属键、配位键和氢键等的基本条件和规律性，熟悉原子的软硬酸碱分类和成键规则；熟悉价电子对互斥模型要点和各种常见分子构型的几何特征；会讨论各种键型的化学本质和分析典型实例，建立分子能级与构型密切相关的初步概念。

5. 理解和掌握同位素的概念，理解和掌握粒子数守恒核反应原理和核聚变、核裂变以及核衰变等基本核反应类型；了解宇宙元素的合成和演化规律。

**重点和难点：**

**重点是**掌握原子的壳层电子结构和原子光谱项能级相关基础知识，学会由已知光谱项推引其光谱支项；能熟练写出谱项简并度和波函数；能根据洪德规则判定基态光谱项和基态支项；能熟练计算原子磁矩。难点是正确理解单电子和多电子原子结构的空间量子化运动特征和运动耦合规律；正确理解原子轨道磁矩、自旋磁矩和旋-轨耦合磁矩产生的根源及相互关系。

**三、配位化合物的电子结构与性质**

**目标和要求：**

1. 理解和掌握配位化合物的定义以及配位数、配位构型和配位键等概念，熟悉各类配合物的结构特点，熟练掌握配合物的系统命名和书写规范，学会判断和区分各种配合物异构体，判定其对称性类别（所属点群）。

2. 理解晶体场能级分裂模型和分裂能的计算方法，理解和掌握过渡金属正八面体配合物电子组态的书写和高低自旋态的判定规则，学会绘制常见配位构型的轨道能级图；熟悉光谱化学序列及其与配位场分裂能的关系；熟悉金属离子对配位场分裂能的影响规律；学会灵活运用配位场轨道近似理论解决各种实际问题。

3. 理解配位场分子轨道理论精要，熟悉正八面体和正四面体定性分子轨道能级图，并熟练运用于解决电荷迁移光谱、光谱化学序列、以及金属羰基配合物的结构和反应性等问题。

4. 理解配位场谱项能级的弱场和强场处理方案和能量计算，熟悉各种d电子组态的谱项能级图（T-S图）及其性质，理解光谱跃迁选律，学会运用T-S图理论归属各种配合物d-d吸收光谱及解决相关实际问题。

5. 掌握用稳定常数表征配合物热力学稳定性方法，理解稳定常数与配位键强和熵效应的关系；理解配体影响中心金属价态和氧化还原稳定性的方式和程度，学会运用配位场结构理论解释各种配合物稳定性和反应性问题。

6. 理解光合作用和呼吸作用化学原理，掌握各种重要功能蛋白活性中心的配位结构特点和结构-功能原理，并能运用配位场结构理论进行分析和讨论。

**重点和难点：**

重点是掌握配位场结构理论的要点和应用解决实际问题的思路和方法；难点是理解和领会如何正确运用前面章节的知识得出配位场结构理论方法并正确应用于解决实际问题。

**四、晶体结构化学基础**

**目标和要求：**

1. 了解地球元素的相对丰度和存在形态，理解和掌握金属单质的六角、面心立方和体心立方三种基本密堆积结构，以及常见矿物的各种填隙结构规律和特点；理解常见硅酸盐的结构规律；理解和掌握泡林结构规则，并学会运用于对无机矿物结构和分子式的理论解释。

2. 理解和掌握晶体结构中的对称元素及其符号和图形表示；理解和掌握七个晶系14种晶格点阵和螺旋轴、滑移面等基本概念，学会解读晶体点群和空间群国际符号的含义；学会解读常用空间群的对称元素晶格分布图，并能正确计算一般点位数和写出等效点坐标；理解单形、等效晶面和聚形等概念及其与宏观晶体对称性的关系。

3. 理解和掌握分子识别、结构位点信息、分子自组织和自组装等超分子化学基本概念；理解用配位模板法设计合成配位超分子的基本思路和程序结构分析方法与原则；理解X-射线法测定晶体结构的基本原理，掌握衍射条件（Bragg方程）、晶面指标、倒易点阵、结构因子和晶胞参数等基本概念，学会运用程序工具处理和分析晶体结构，研究分子识别和超分子自组装结构规律。

4. 理解物质磁性的本质，掌握描述物质宏观磁性的基本物理量；理解和掌握居里定律和居里-外斯定律，及其与物质铁磁性、亚铁磁性和反铁磁性的关系；理解铁磁性的起因和晶态物质结构-磁性关系，学会根据配合物的结构判定磁性类别和解读磁性-温度曲线。

5. 理解能带结构理论要点，掌握价带、导带和禁带，以及态密度和费米面等基本概念；理解带隙与结构的关系，学会用能带理论解读无机材料的磁性和导电性等各种性能；掌握结构对称性与无机晶体介电性的关系；理解和掌握无机固体发光机理，了解发光材料的应用研究；了解无机固体的颜色和透光性能；电导和超导体；以及医用和核能源无机材料的应用研究。

**重点和难点：**

重点掌握晶体结构对称性基础知识，并学会运用于晶体超分子结构分析和配位超分子设计；学会运用程序工具处理和分析晶体结构，研究分子识别和超分子自组装结构规律；掌握衍射条件（Bragg方程）、晶面指标、倒易点阵、结构因子和晶胞参数等基本概念；掌握基本类型无机矿物晶体结构特点和材料性能，学会用能带理论解读无机材料的磁性和导电性等各种性能。难点是理解和掌握空间群对称元素与晶体结构的关系；理解X-射线法测定晶体结构的基本原理；理解物质磁性的本质和能带结构理论要点及其应用

**五、化学反应原理**

1.掌握状态函数，掌握热力学第一定律、反应的标准摩尔焓变的求法及Hess定律。

2.掌握化学反应速率方程式及影响反应速率的因素、反应速率理论。掌握标准平衡常数的表达和应用；掌握自发变化与焓、熵及吉布斯函数的关系。

3.通过对酸碱理论的学习掌握酸碱质子论、一元、多元弱酸碱的解离平衡。

4.掌握溶解度和溶度积的概念及它们之间的关系；掌握沉淀的生成和溶解及两种沉淀之间的相互转化。

5.掌握氧化还原反应的基本概念及方程式的配平；理解电极电势的概念及熟练应用能斯特方程进行计算；掌握电极电势的应用及电势图的应用。

**重点和难点：**

状态函数的性质，焓和焓变，热力学第一定律，Hess定律。反应速率方程的表达及反应级数的求法，阿累尼乌斯公式，反应速率理论，催化剂催化作用的实质。标准平衡常数的表达，利用标准平衡常数计算平衡组成，吉布斯函数判据，自发变化与焓、熵、吉布斯函数的关系。酸碱质子论，弱酸碱的解离平衡，缓冲溶液。溶解度和溶度积之间的关系，溶度积规则，沉淀的转化。电极电势的理解。