

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ЮГОРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»



УТВЕРЖДАЮ

Ректор

Р.В. Кучин

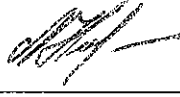
ПРОГРАММА

вступительного испытания по специальной дисциплине для
поступающих на обучение по программам подготовки научных и научно-
педагогических кадров в аспирантуре 1.4.4 Физическая химия

Ханты-Мансийск
2022г.

Программа разработана в соответствии с федеральными государственными требованиями по научной специальности 1.4.4 Физическая химия, Приказом Министерства науки и высшего образования РФ от 20 октября 2021 г. № 951 "Об утверждении федеральных государственных требований к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), условиям их реализации, срокам освоения этих программ с учетом различных форм обучения, образовательных технологий и особенностей отдельных категорий аспирантов (адъюнктов)", Федеральным законом от 29.12.2012 г. № 273-ФЗ «Об образовании в Российской Федерации».

Разработчики рабочей программы:

Фамилия, имя, отчество	Учёная степень	Должность	Подпись
Клименко Любовь Степановна	Доктор химических наук	Профессор ИНиГ	

1. Назначение и область применения

Программа определяет требования к содержанию вступительных испытаний в аспирантуру по научной специальности 1.4.4 Физическая химия и предназначена для проведения вступительных испытаний в аспирантуру по научной специальности 1.4.4 Физическая химия.

2. Форма вступительного испытания

Вступительное испытание проводится в форме **тестирования и собеседования**.

3. Процедура проведения вступительного испытания

Процедура проведения вступительного испытания в форме тестирования.

Компьютерное тестирование проводится в компьютерном классе специалистами приемной комиссии. На вступительное испытание допуск в аудиторию осуществляется в соответствии со списком допущенных на экзамен по предъявлении паспорта.

Абитуриентам запрещается иметь при себе и использовать средства связи и электронно-вычислительную технику, иные посторонние предметы, использовать источники информации, не предусмотренные процедурой проведения вступительного испытания по данному предмету (книги, учебные пособия, справочники, шпаргалки, компьютеры и т.п.).

При нарушении порядка проведения тестирования уполномоченные лица вправе удалить абитуриента с места проведения вступительного испытания.

Вход в систему тестирования осуществляется по логину и паролю, которые отправляются по электронной почте за день до тестирования.

Тест состоит из трёх частей:

I часть: состоит из **10** вопросов с выбором ответа (во всех заданиях должен быть один правильный ответ из предложенных). Каждый ответ оценивается в **2 балла**.

II часть: состоит из **10** вопросов с выбором ответа (во всех заданиях должен быть один правильный ответ из предложенных). Каждый ответ оценивается в **3 балла**.

В течение 90 минут абитуриент должен выполнить тестовые задания.

Для оценивания ответа поступающего используется 50-балльная шкала. Необходимое минимальное количество баллов – 25.

На экзамене при себе поступающий должен иметь черную ручку, паспорт.

Процедура проведения вступительного испытания в форме собеседования.

Сдача вступительного испытания проходит в очном формате в форме собеседования.

Целью собеседования является определение готовности поступающего освоить выбранную аспирантскую программу, определение лично-профессиональных качеств абитуриента.

Каждому поступающему, в соответствии с программой, предлагается **2 вопроса**, по которым будет проводиться собеседование, даётся время на подготовку ответа (30 минут). Собеседование проводится в устной форме и предполагает ответ абитуриента по предложенным вопросам, при необходимости (неполном, неточном ответе, неправильном употреблении терминов и др.) ему могут быть заданы дополнительные вопросы. Для оценивания ответа поступающего используется 50-балльная шкала. Необходимое минимальное количество баллов – 25.

Результаты собеседования оформляются протоколом экзаменационной комиссии.

4. Основное содержание программы

На вступительном экзамене соискатель должен продемонстрировать основные компетенции, сформированные в процессе освоения дисциплины «Физическая химия» и смежных с ней дисциплин в высшем учебном заведении по программам специалитета или магистратуры.

Поступающий в аспирантуру должен знать методы описания химических явлений с помощью законов физики; основы термодинамических расчетов и прогнозирования протекания химических процессов; кинетику химических реакций; основные положения классической теории химического строения; электрические и магнитные свойства молекулярных систем и строение конденсированных фаз; теории растворов, фазовых равновесий, электрохимических процессов.

В основу настоящей программы положены следующие разделы физической химии: учение о строении вещества, химическая термодинамика, теория поверхностных явлений, учение об электрохимических процессах, теория кинетики химических реакций, учение о катализе.

Раздел 1. Введение

Предмет физической химии. Понятие о физико-химических системах. Связь физической химии с другими химическими и химико-технологическими дисциплинами. Значение физической химии для развития химической технологии. Методы исследования физико-химических систем. Основные проблемы и задачи физической химии. Термодинамический и кинетический подходы к описанию физико-химических систем на микро- и макроуровнях.

Раздел 2. Начала термодинамики. Термодинамические функции

Предмет и задачи термодинамики. Основные понятия термодинамики: система, теплота, работа, внутренняя энергия. Первый закон термодинамики. Тепловой эффект изохорного и изобарного процессов. Понятие об энтальпии. Теплоемкость, ее использование для расчетов тепловых эффектов процессов. Расчет теплоты газов и твердых тел по Эйнштейну, Дебаю, Нейманну и Кошпу. Расчет тепловых эффектов химических реакций. Закон Гесса. Стандартные энтальпии образования соединений. Тепловые эффекты реакций в растворах. Стандартные энтальпии образования ионов. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Закон Кирхгофа. Второе начало термодинамики. Понятие об энтропии. Определение энтропии через термодинамическую вероятность. Закономерности изменения энтропии. Третье начало термодинамики. Вычисление энтропии. Энтропия ионов в растворах. Учение о химическом средстве. Термодинамические потенциалы Гельмгольца и Гиббса, их вычисление. Определение направления протекания химических реакций.

Раздел 3. Химическое равновесие. Термодинамический расчет реакционных систем

Парциальные молярные величины, их определение по экспериментальным данным и путем интегрирования уравнения Гиббса-Дюгема. Химический потенциал, его значение для компонента идеального газа, идеального раствора, предельно разбавленного раствора

и для реальных систем. Понятие об активности и фугитивности. Уравнение изотермы реакций. Константа равновесия. Расчет равновесного состава реакционной смеси. Влияние внешних условий на равновесие. Принцип Ле-Шателье. Выбор оптимальных условий для проведения реакций. Вычисление константы равновесия при различных температурах по уравнению изобары реакции, по приведенным энергиям Гиббса, по методу Темкина и Шварцмана.

Раздел 4. Фазовые равновесия в однокомпонентных системах

Основные понятия: фаза, составляющее вещество, компонент системы, термодинамические степени свободы. Правило фаз Гиббса. Уравнение Клапейрона-Клаузиуса. Его использование для расчета фазовых равновесий в однокомпонентных системах. Фазовые диаграммы в однокомпонентных системах. Диаграмма состояния воды.

Раздел 5. Термодинамические свойства растворов

Закон Рауля для идеальных и предельно разбавленных растворов. Учет диссоциации растворенного вещества. Растворимость газов, законы Генри и Сивертса. Температуры замерзания и кипения растворов, криоскопия и эбуллиоскопия. Уравнение Шредера. Осмотическое давление растворов. Обратный осмос, его использование для очистки стоков и опреснения воды. Определение степени и константы диссоциации слабых электролитов, кажущейся степени диссоциации и коэффициента активности сильных электролитов по экспериментально полученному значению изотонического коэффициента. Определение молярной массы органических веществ методом криоскопии и эбуллиоскопии.

Образование растворов электролитов. Сольватация и ассоциация, Теория гидратации. Теория активностей Дебая-Хюккеля. Обобщенные теории кислот и оснований Бренстеда-Льюиса, Пирсона. Кислотно-основные свойства неводных растворов и расплавов.

Раздел 6. Фазовые равновесия в неконденсированных системах

Диаграммы-состояния двухкомпонентных систем жидкость – пар с полной взаимной растворимостью компонентов жидкой фазе. Идеальные системы. Расчет диаграммы по закону Рауля. Первый закон Коновалова. Нода. Правило рычага. Разгонка жидких смесей. Понятие о ректификации. Отклонения от идеальности. Азеотропия. Второй закон Коновалова. Диаграммы систем с полной взаимной нерастворимостью компонентов в жидкой фазе. Перогонка с водяным паром. Диаграммы систем жидкость – жидкость. Экстракция. Закон распределения Нернста. Классификация механизмов и основные закономерности экстракции, действие высаливателя и разбавителя, самовысаливание и влияние рН. Диаграмма систем жидкость – пар с ограниченной взаимной растворимостью компонентов в жидкой фазе.

Раздел 7. Фазовые равновесия в конденсированных системах

Диаграммы состояния двухкомпонентных систем с полной взаимной нерастворимостью компонентов в твердой фазе. Метод дифференциально-термического анализа. Построение диаграмм. Расчет диаграмм по уравнению Шредера. Твердые растворы, ограниченный и неограниченный изоморфизм. Системы с твердыми растворами: идеальные, с минимумом температуры плавления, эвтектического и перитектического типов. Системы с конгруэнтно и инконгруэнтно плавящимися соединениями. Проявление на диаграммах полиморфных превращений и расслаивания

жидкой фазы. Определение тепловых эффектов фазовых превращений по методу Таммана.

Раздел 8. Электрохимические равновесия

Термодинамическая теория ЭДС. Удельная и эквивалентная электропроводность. Подвижность ионов. Факторы, определяющие подвижность ионов. Определение качества воды, константы диссоциации слабых электролитов, предельной электропроводности ионов и растворимости соединений кондуктометрическим методом. Термодинамика электрохимических систем. Электродный потенциал. Гальванический элемент. Уравнение Нернста. Типы электродов. Определение коэффициента активности электролитов, растворимости соединений, константы устойчивости комплексов, константы равновесия окислительно-восстановительной реакции потенциометрическими методами. Ионметрия. Диаграммы Пурбе.

Раздел 9. Химическая кинетика

Формальная кинетика. Порядок реакции и способы его определения. Кинетика сложных гомогенных, фотохимических, цепных и гетерогенных реакций. Зависимость скорости реакции от температуры. Энергия активации. Теория активных столкновений и переходного состояния (активированного комплекса). Механизм гомогенного и гетерогенного катализа. Ферментативный катализ. Кинетика электрохимических процессов. Поляризация электродов. Диффузионное и электрохимическое перенапряжение.

5. Примерные вопросы собеседования

1. Основные положения классической теории химического строения.
2. Структурная формула и граф молекулы
3. Физические основы учения о строении молекул.
4. Электронное строение атомов и молекул.
5. Электрические и магнитные свойства.
6. Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий.
7. Основные результаты и закономерности в строении молекул.
8. Особенности строения поверхности жидкостей, структура границы раздела конденсированных фаз.
9. Симметрия молекулярных систем.
10. Влияние симметрии равновесной конфигурации ядер на свойства молекул и их динамическое поведение.
11. Основные начала термодинамики
12. Химическое равновесие. Закон действующих масс.
13. Микро- и макросостояния химических систем.
14. Основные положения термодинамики неравновесных процессов.
15. Различные типы растворов. Способы выражения состава растворов.
16. Гетерогенные системы.
17. Адсорбция и поверхностные явления
18. Растворы электролитов. Электрохимические процессы
19. Основные понятия химической кинетики. Простые и сложные реакции, молекулярность и скорость простой реакции
20. Кинетические уравнения. Константа скорости и порядок реакции.
21. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций.
22. Реакции в потоках идеального вытеснения и идеального смешения.
23. Макрокинетика. Роль диффузии в кинетике гетерогенных реакций.

24. Кинетика гетерогенных каталитических реакций.
25. Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса.
26. Энергия активации и способы ее определения.
27. Различные типы химических реакций.
28. Бимолекулярные и тримолекулярные реакции, зависимость предэкспоненциального множителя от температуры.
29. Классификация каталитических реакций и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия.
30. Катализ металлокомплексными соединениями. Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы.
31. Гетерогенный катализ. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции.
32. Селективность катализаторов. Роль адсорбции в кинетике гетерогенных каталитических реакций.
33. Неоднородность поверхности катализаторов, нанесенные катализаторы.
34. Энергия активации гетерогенных каталитических реакций.
35. Современные теории функционирования гетерогенных катализаторов.
36. Основные промышленные каталитические процессы
37. Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. Условие ядерного магнитного резонанса.
38. Принципы спектроскопии электронного парамагнитного (спинового) резонанса. Условие ЭПР. g-Фактор и его значение.
39. Электрический квадрупольный момент ядер. Взаимодействие "квадрупольного" ядра с неоднородным электрическим полем.
40. Принципы масс-спектрометрии. Блок-схема масс-спектрометра. Отношение массы к заряду.
41. Основные характеристики излучения (частота, длина волны, волновое число). Электронные, колебательные, вращательные, спиновые и ядерные переходы как результат различных типов внутриатомных или внутримолекулярных взаимодействий.
42. Правила отбора и интенсивность в ИК поглощении и в спектрах КР. Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР).
43. Фотоакустическая ИК-спектроскопия, метод фототермического отклонения луча.
44. Спектры сопряженных систем и пространственные эффекты в электронных спектрах поглощения.
45. Природа рентгеновских спектров. Взаимосвязь рентгеновских спектров поглощения и характеристических спектров испускания.
46. Наночастицы и наноматериалы.
47. Новые полупроводниковые материалы с позиционной неупорядоченностью кристаллической решетки.
48. Радиолокация. физические основы и проблемы.
49. Физические основы и методы получения магнитного поля.
50. Фотоэлектрическое преобразование солнечной энергии.

6. Список рекомендуемой литературы

1. Борщевский, А. Я. Физическая химия : том 1: Общая химическая термодинамика / А.Я. Борщевский. - 1. - Москва : ООО "Научно-издательский центр ИНФРА-М", 2017. - 606 с.
2. Ссылка: <http://znanium.com/catalog/document/?pid=543133&id=95028>
3. Борщевский, А. Я. Физическая химия : том 2: Статистическая термодинамика / А.Я. Борщевский. - 1. - Москва : ООО "Научно-издательский центр ИНФРА-М", 2017. - 382 с. Ссылка: <http://znanium.com/catalog/document/?pid=543170&id=45078>

4. Зарубин, Д. П. Физическая химия : учебное пособие / Д.П. Зарубин. - 1. - Москва : ООО "Научно-издательский центр ИНФРА-М", 2017. - 474 с. Ссылка: <http://znanium.com/catalog/document/?pid=469097&id=179292>
5. Дерябин, Владимир Андреевич. Физическая химия дисперсных систем : Учебное пособие для вузов / В. А. Дерябин, Е. П. Фарафонтова, Е. А. Кулешов. - Москва : Юрайт, 2020. - 86 с. Ссылка: <https://urait.ru/bcode/454613>
6. Попова, А. А. Физическая химия / А. А. Попова, Т. Б. Попова. - Санкт-Петербург : Лань, 2015. - 496 с. Ссылка: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=63591
7. Морачевский, А. Г. Физическая химия. Гетерогенные системы : учебное пособие / А. Г. Морачевский, Е. Г. Фирсова. - 2-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2015. - 192 с. Ссылка: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=60048

Для освоения дисциплины (модуля) инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья предоставляются основная и дополнительная учебная литература в виде электронного документа в фонде библиотеки и / или в электронно-библиотечных системах. А также предоставляются бесплатно специальные учебники и учебные пособия, иная учебная литература и специальные технические средства обучения коллективного и индивидуального пользования, а также услуги сурдопереводчиков и тифлосурдопереводчиков.

6. Рекомендуемые ресурсы сети "Интернет"

№	Ссылка на информационный ресурс	Наименование ресурса в электронной форме	Доступность
1	http://e.lanbook.com	ЭБС издательства «Лань»	авторизированный доступ
2	http://znanium.com	ЭБС «ZNANIUM.COM»	авторизированный доступ
3	https://urait.ru/	ЭБС «Urait»	авторизированный доступ