

**БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
Ханты-Мансийского автономного округа – Югры
«Сургутский государственный университет»**

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебно-методической
работе

Е.В. Коновалова

«28» августа 2018 г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ

**«Дисциплина/дисциплины (модули), в том числе направленные на
подготовку к сдаче кандидатских экзаменов»**

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки

Направленность программы:
Физическая химия

Отрасль науки:
Химические науки

Квалификация:
Исследователь. Преподаватель-исследователь

Форма обучения:
очная

Сургут, 2018 г.


Рабочая программа составлена в соответствии требованиями с:

1. Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению 04.06.01 Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации), Утвержденным приказом Минобрнауки РФ от 30.07.2014 г. № 869

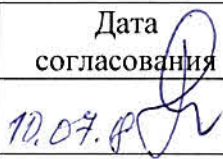
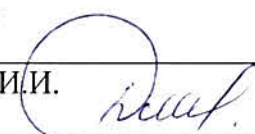
2. Приказа Министерства образования и науки РФ от 30 апреля 2015 г. № 464 «О внесении изменений в федеральные государственные образовательные стандарты высшего образования (уровень подготовки кадров высшей квалификации)»

3. Приказа Министерства образования и науки Российской Федерации от 28 марта 2014 г. №247 «Об утверждении Порядка прикрепления лиц для сдачи кандидатских экзаменов, сдачи кандидатских экзаменов и их перечня».

Автор программы:

 д.х.н., профессор Ботиров Э.Х.

Согласование рабочей программы

Подразделение (кафедра/ библиотека)	Дата согласования	Ф.И.О., подпись нач. подразделения
Кафедра химии	10.07.18 	Виссер Е.Е.
Отдел комплектования	10.07.18	Дмитриева И.И. 


Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии

«10» июля 2018 года, протокол № 168

Заведующий кафедрой  к.х.н., доцент Виссер Е.Е.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании Учебно-методического совета Института естественных и технических наук «18» июля 2018 года, протокол № 45.

Председатель УС института
к.х.н., доцент

 Ю.Ю. Петрова

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ МОДУЛЯ

Целями освоения модуля «Дисциплины, направленные на подготовку к сдаче кандидатского экзамена» являются:

- формирование у обучающихся универсальных, общепрофессиональных и профессиональных компетенций в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки»;
- системное освоение основных теоретических положений физической химии и смежных дисциплин;
- подготовка к самостоятельной научно-исследовательской деятельности в современных направлениях физической химии;
- глубокая специализированная подготовка в выбранном направлении, владения навыками современных методов исследования;
- подготовка к научно-педагогической работе в высших учебных заведениях;
- формирование у обучающихся умение находить и анализировать современную научно-техническую информацию в области физической химии;
- формирование у обучающихся умение формулировать научные задачи в области физической химии;

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

«Дисциплина/дисциплины (модули), в том числе направленные на подготовку к сдаче кандидатских экзаменов» относятся к обязательным дисциплинам и дисциплинам по выбору вариативной части ОПОП ВО аспирантуры; модуль включает следующие обязательные дисциплины: «Физическая химия», «Спектроскопические методы исследований», «Физико-химические методы исследований», «Высокомолекулярные соединения».

Преподавание дисциплин модуля осуществляется на 2 году обучения, в 3 семестре. Предшествующими для изучения дисциплин модуля являются знания, умения и навыки, приобретенные аспирантами:

- при изучении дисциплин базовой части «История и философия науки», «Иностранный язык», «Научно-исследовательский семинар «Научные исследования в области химических наук»,

- при изучении обязательных дисциплин вариативной части «Методология диссертационного исследования и подготовки научных публикаций», «Педагогика и психология высшей школы»,

- при изучении факультативных дисциплин «Основы патентоведения», «Информационные технологии в науке и образовании»,

- при проведении научных исследований и подготовке научно-квалификационной работы (диссертации) на соискание ученой степени кандидата химических наук.

Последующими к изучению дисциплин модуля являются знания, умения и навыки, используемые аспирантами:

- в процессе научно-исследовательской деятельности и подготовке научно-квалификационной работы (диссертации) на соискание ученой степени кандидата химических наук;

- при прохождении практики по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности (научно-исследовательская практика);

- при подготовке к сдаче и сдаче государственного экзамена, представлении научного доклада об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации).

Изучение данного модуля завершается сдачей кандидатского экзамена. Кандидатский экзамен по дисциплине специальности является составной частью аттестации научных и научно-педагогических кадров в системе профессионального образования Российской Федерации, сдача кандидатского экзамена обязательна для соискателей ученой степени кандидата наук.

Изучение дисциплин модуля, направленных на подготовку к сдаче кандидатского экзамена в системе профессионального образования предполагает наличие у аспирантов базовых знаний, умений и навыков, полученных при изучении дисциплин «Физическая химия», «Высокомолекулярные соединения», «Физико-химические методы исследований», «Спектроскопические методы исследований», «Квантовая механика и квантовая химия» на уровне специалитета и магистратуры.

Модуль «Дисциплины, направленные на подготовку к сдаче кандидатского экзамена» является важным составным компонентом 3-й ступени высшего образования и направлен на углубленное изучение методологических и теоретических основ химических наук, формирование умений и навыков самостоятельной научно-исследовательской и научно-педагогической деятельности, совершенствование химического образования ориентированного на профессиональную деятельность, формирование компетенций, необходимых для успешной научно-педагогической работы в данной отрасли науки, подготовку научно-педагогических кадров высшей квалификации, способных к инновационной деятельности в сфере науки.

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ МОДУЛЯ

В результате освоения модуля аспирант должен обладать следующими компетенциями:

- ОПК-1** – способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий;
- ПК-2** – способностью экспериментально определять термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов;
- ПК-3** – способностью определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями;
- ПК-4** – способностью определять термодинамические характеристики процессов на поверхности, владением закономерностями адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях;
- ПК-5** – способностью определять механизмы сложных химических процессов, владеть законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий;
- УК-1** – способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.

В результате освоения модуля обучающийся должен:

Знать:

достижения структурного анализа, изучения свойств и создания модельных систем для исследования физико-химических процессов, термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов, способы определения и расчета параметров строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями, термодинамические характеристики процессов на поверхности, закономерности адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях, механизмы сложных химических процессов, владеть законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий, основные достижения и тенденции развития физической химии.

Уметь:

в рамках поставленной задачи самостоятельно планировать экспериментальную работу, определять термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов, определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями, определять термодинамические характеристики процессов на поверхности, закономерности адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях, определять механизмы сложных химических процессов, владеть законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий, интерпретировать результаты эксперимента на основе современного научного знания, делать заключение на основе полученных экспериментальных данных.

Владеть:

современными методами математической и статистической обработки экспериментальных данных, навыками экспериментального определения термодинамические свойства веществ, расчета термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов, навыками определения и расчета параметров строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями, навыками определения термодинамические характеристики процессов на поверхности, закономерностей адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях, навыками определения механизмы сложных химических процессов, владеть законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий, основными методами химических и физико-химических анализов.

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ МОДУЛЯ

4.1. Общая трудоемкость модуля составляет 8 зачетных единиц, 288 часов.

4.2. Содержание компетенций.

Разделы (или темы) дисциплины	Коды компетенций	Общее количество компетенций
Дисциплина 1. «Физическая химия»		
Раздел 1 . Химическая термодинамика	ПК-2, ПК-3	2
Раздел 2. Химическое равновесие	ПК-2, ПК-3	2

Раздел 3. Растворы. Фазовые равновесия.	ПК-2, ПК-3	2
Раздел 4. Адсорбция и поверхностные явления	ПК-2, ПК-3	2
Раздел 5. Электрохимические процессы	ПК-2, ПК-3	2
Раздел 6. Химическая кинетика. Катализ	ПК-2, ПК-3	2
2. Дисциплина «Спектроскопические методы исследований»		
Раздел 1. Основные понятия и определения. Теоретические основы спектроскопии	ОПК-1, ПК-3, УК-1	3
Раздел 2. Методы атомной спектроскопии	ОПК-1, ПК-3, УК-1	3
Раздел 3. Методы молекулярной спектроскопии	ОПК-1, ПК-3, УК-1	3
Раздел 4. Люминесцентные методы	ОПК-1, ПК-3, УК-1	3
Раздел 5. Лазерная спектроскопия	ОПК-1, ПК-3, УК-1	3
Раздел 6. Химическая кинетика. Катализ	ОПК-1, ПК-3, УК-1	3
3. Дисциплина «Физико-химические методы исследования»		
Раздел 1. Электронная УФ спектроскопия	ПК-2, ПК-3	2
Раздел 2. Колебательная ИК спектроскопия	ПК-2, ПК-3	2
Раздел 3. Масс-спектрометрия	ПК-2, ПК-3	2
Раздел 4. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса. Совместное использование масс-спектрометрии, УФ, ИК, ПМР и ЯМР ¹³ C спектроскопии	ПК-2, ПК-3	2
4. Дисциплина «Высокомолекулярные соединения»		
Раздел 1. Химия полимеров и полимерных материалов.	ПК-4, ПК-5	2
Раздел 2. Радикальная полимеризация и ее механизм.	ПК-4, ПК-5	2
Раздел 3. Сополимеризация, ее механизм и основные закономерности.	ПК-4, ПК-5	2
Раздел 4. Методы получения полимерных композиционных материалов. Физика полимеров и полимерных композиционных материалов.	ПК-4, ПК-5	2
Раздел 5. Физические и фазовые состояния полимеров. Физико-механические свойства полимеров.	ПК-4, ПК-5	2

4.3 Содержание разделов

№ п/п	Разделы (темы) модуля (дисциплин)	Семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)				Формы текущего контроля успеваемости Форма промежуточной аттестации
			Лекционные занятия	Практические занятия	Лабораторные работы	Самостоятельная работа	
1	Дисциплина «Физическая химия» Раздел 1. Химическая термодинамика	3	8	6	-	6	Устный опрос, решение расчетных задач
2	Раздел 2. Химическое равновесие	3	4	5	-	6	Устный опрос, решение расчетных задач

3	Раздел 3. Растворы. Фазовые равновесия.	3	5	4	-	6	Устный опрос, решение задач
4	Раздел 4. Адсорбция и поверхностные явления	3	4	4	-	8	Устный опрос
5	Раздел 5. Электрохимические процессы	3	4	5	-	6	Устный опрос
6	Раздел 6. Химическая кинетика. Катализ	3	7	8	-	12	Устный опрос, решение расчетных задач
	Всего:		32	32	-	44	<i>Контрольная работа</i>
7	Дисциплина 2. Раздел 1. Основные понятия и определения. Теоретические основы спектроскопии	3	2	2	-	6	Тестирование по темам раздела (задания 01-03, 06, 08)
8	Раздел 2. Методы атомной спектроскопии	3	4	4	-	8	Тестирование по темам раздела (задания 01, 05, 06, 11, 15, 16)
9	Раздел 3. Методы молекулярной спектроскопии	3	4	4	-	8	Тестирование по темам раздела (задания 04, 07, 08, 09-16, 17-19)
10	Раздел 4. Люминесцентные методы	3	2	2	-	6	Тестирование по темам раздела (задания 20-22)
11	Раздел 5. Лазерная спектроскопия	3	2	2	-	6	Устный опрос (вопросы 1-2, 3-4)
12	Раздел 6. Мессбауэровская и рентгеновская спектроскопия	3	2	2	-	6	Тестирование по темам раздела (задания 23-24)
	Всего:	3	16	16	-	40	
13	Дисциплина 3. Раздел 1. Электронная УФ спектроскопия	3	4	3	-	8	Тестирование по темам раздела (задания 1, 3, 5, 13)
14	Раздел 2. Колебательная ИК спектроскопия	3	2	3	-	6	Тестирование по темам раздела (задания 2-7, 13-14)
15	Раздел 3. Масс-спектрометрия	3	4	4	-	8	Тестирование по темам раздела (задания 8-12)
16	Раздел 4. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса. Совместное использование масс-спектрометрии, УФ, ИК, ПМР и ЯМР ¹³ C спектроскопии	3	6	6	-	18	Тестирование по темам раздела (задания 13-24)
	Всего:	3	16	16	-	40	
17	Дисциплина 4. Раздел 1. Химия полимеров и полимерных материалов.	3	3	2	-	6	Устный опрос
18	Раздел 2. Радикальная полимеризация и ее механизм.	3	4	4	-	8	Устный опрос

19	Раздел 3. Сополимеризация, ее механизм и основные закономерности.	3	3	3	-	8	Устный опрос, тестирование
20	Раздел 4. Методы получения полимерных композиционных материалов. Физика полимеров и полимерных композиционных материалов.	3	4	4	-	10	Устный опрос
21	Раздел 5. Физические и фазовые состояния полимеров. Физико-механические свойства полимеров.	3	2	3	-	8	Устный опрос, тестирование
	Всего:	3	16	16	-	40	
	Итого 288 ч.		64	64	-	124	кандидатский экзамен (36 ч.)

5. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ МОДУЛЯ
(Приложение к рабочей программе по модулю: Фонды оценочных средств)

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ МОДУЛЯ

а) список основной литературы

1. Лебухов, В. И. Физико-химические методы исследования : учебник / В. И. Лебухов, А. И. Окара, Л. П. Павлюченкова .— Москва : Лань, 2012 .— 480 с. — (Учебник для вузов. Специальная литература) .— Рекомендовано УМО вузов России по образованию в области товароведения и экспертизы товаров в качестве учебника для подготовки бакалавров и магистров по направлению 100800 — «Товароведение» .— Библиогр.: с. 479 .— ISBN 978-5-8114-1320-1 : 944 р. 90 к. — <URL:http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=4543>.
2. Атомно-абсорбционный анализ [Текст] : учебное пособие / [А. А. Ганеев и др.] .— СПб. [и др.] : Лань, 2011 .— 303 с. : ил., табл. ; 21 .— (Учебники для вузов, Специальная литература) .— Библиогр. в конце гл. .— ISBN 978-5-8114-1117-7, 700.
3. Спектральные методы анализа [Электронный ресурс] : Учебное пособие / Е. В. Пашкова [и др.] .— Ставрополь : Ставропольский государственный аграрный университет, 2017 .— 56 с. — Книга находится в премиум-версии ЭБС IPR BOOKS.
4. Киреев, Вячеслав Васильевич. Высокомолекулярные соединения : Учебник / В. В. Киреев .— Электрон. дан. — Москва : Издательство Юрайт, 2015 .— 602 .— (Бакалавр. Академический курс) .— Режим доступа: <https://www.biblio-online.ru> .— Internet access .— ISBN 978-5-9916-5019-9 : 1089.00 .— <URL:<https://www.biblio-online.ru/book/vysokomolekulyarnye-soedineniya-384098>> .— <URL:<https://www.biblio-online.ru/book/cover/BC7BCB63-3CC0-4F78-BC2F-FCA57C9E2005>>.
5. Химическая кинетика. Теория и практика [Электронный ресурс] : Учебное пособие / Г. Е. Заиков [и др.] .— Казань : Казанский национальный исследовательский технологический университет, 2013 .— 80 с. — Книга находится в премиум-версии ЭБС IPR BOOKS. .— ISBN 978-5-7882-1518-1 .
6. Степановских, Елена Ивановна. Физическая химия: теория и практика выполнения расчетных работ : в 2 ч. ч. 1 Экстенсивные свойства гомогенных

- систем : Учебное пособие .— 2, стер. — Москва : Издательство "Флинта", 2017 .— 135 с. — <URL:http://znanium.com/go.php?id=959353>.
7. Чоркендорф, Иб. Современный катализ и химическая кинетика [Текст] : [учебное пособие] / И. Чоркендорф, Х. Наймантсведрайт ; пер. с англ. В. И. Ролдугина .— 2-е издание .— Долгопрудный : Издательский Дом "Интеллект", 2013 .— 500, [3] с. : ил. ; 25 .— Библиография в конце глав .— ISBN 978-5-91559-153-9 (в обл.) .— ISBN 978-3-527-31672-4.
 8. Стромберг, Армин Генрихович. Физическая химия : Учебник для студентов высших учебных заведений / А. Г. Стромберг, Д. П. Семченко ; Под ред. А. Г.Стромберга .— 4-е изд., испр. — М. : Высшая школа, 2001 .— 526 с. — Предм. указ.: с. 516- 522 .— Библиогр.: с. 511-515 .— ISBN 5-06-003627-8 : 170,00.
 9. Эткинс, П. Физическая химия [Текст] = Atkin's Physical Chemistry : в 3 ч. : [учебные пособия] / П. Эткинс, Дж. де Паула .— М. : Мир, 2007 .— (Лучший зарубежный учебник) .— ISBN 5-03-003789-6.
 10. Практикум по физической химии. Термодинамика [Текст] : учебное пособие для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению "Химия" и специальности "Химия" / [Е. П. Агеев и др.] ; под ред. Е. П. Агеева, В. В. Лунина .— М. : Академия, 2010 .— 218, [1] с. : ил. ; 22 .— (Высшее профессиональное образование, Естественные науки) (Учебное пособие) .— Авт. указаны на обороте тит. л. — Библиогр. в конце разд. и в подстрочн. примеч. .— ISBN 978-5-7695-6809-1, 1800.
 11. Пентин, Юрий Андреевич. Физические методы исследования в химии [Текст] : учебник для студентов вузов / Ю. А. Пентин, Л. В. Вилков .— М. : Мир, 2006 .— 683 с. : ил. ; 22 .— (Методы в химии) .— На авантит. авт.: Пентин Ю.А., проф., д.х.н., засл. деят. науки РФ и засл. проф. МГУ, Вилков Л.В., проф., д.х.н., засл. деят. науки РФ .— Библиогр.: с. 658-661 .— Предм. указ.: с. 662-673 .— ISBN 5--03-003770-5 : 510,40, 5000.

b) список дополнительной литературы

1. Шишонко, М. В. Высокомолекулярные соединения [Электронный ресурс] : Учебное пособие / М. В. Шишонко .— Высокомолекулярные соединения, 2020-02-24 .— Минск : Вышэйшая школа, 2012 .— 535 с. — Книга находится в премиум-версии ЭБС IPR BOOKS. .— ISBN 978-985-06-1666-1 .
2. Отто, Маттиас. Современные методы аналитической химии [Текст] / М. Отто ; пер. с нем. под ред. А. В. Гармаша .— 2-е испр. изд. — М. : Техносфера, 2006 (Самара : Самарский Дом печати) .— 543 с. : ил., табл. ; 24 см .— (Мир химии) .— Библиогр. в конце гл. — Предм. указ.: с. 535-543 .— ISBN 5-94836-072-5 : 370,00.
3. Байрамов В. М. Хим. кинетика и катализ : Примеры и задачи с решениями : Учеб. пособ. для студ. хим. факультетов университетов / В. М. Байрамов. - М.: Academia, 2003. -316 с.
4. Байрамов, Вадим Михайлович. Химическая кинетика и катализ : Примеры и задачи с решениями : Учебное пособие для студентов химических факультетов университетов / В. М. Байрамов .— М. : Academia, 2003 .— 316 с. : ил. — (Высшее образование) .— ISBN 5-7695-1293-8 : 198,00 : 200,20.
5. Артемов, Арсений Валерьевич. Физическая химия [Текст] : учебник для студентов учреждений высшего профессионального образования / А. В. Артемов .— Москва : Издательский центр "Академия", 2013 .— 283, [1] с. : ил. ; 22 .— (Высшее

- профессиональное образование) (Бакалавриат) (Учебник) .— Библиография: с. 282 (13 назв.) .— ISBN 978-5-7695-9550-9, 1000.
6. Зимон, Анатолий Давыдович. Физическая химия : Учебник для студентов технологических специальностей высших учебных заведений / А. Д. Зимон .— М. : Агар, 2003 .— 315, [2] с. : ил. — Библиогр. : с. 317 .— ISBN 5-89218-149-9 : 100,00
 7. Слободов, А. А. Основы химической термодинамики [Электронный ресурс] : Учебное пособие / А. А. Слободов, В. А. Липин, А. Б. Липин .— Основы химической термодинамики, 2022-10-01 .— Санкт-Петербург : Университет ИТМО, 2014 .— 65 с. — Книга находится в премиум-версии ЭБС IPR BOOKS.
 8. Шершавина, Алла Александровна. Физическая и коллоидная химия [Текст] : методы физико-химического анализа : учебное пособие / А. А. Шершавина .— М. : Новое знание, 2005 .— 799 с. — Библиогр.: с. 782, 783 .— Указ.: с. 784-794 .— ISBN 5-94735-056-4 : 412,50.
 9. Аналитическая химия [Текст] = Analytical Chemistry : проблемы и подходы : [учебник] : в 2 т. / ред. Р. Кельнер [и др.] ; пер. с англ. А. Г. Борзенко [и др.] ; под ред. Ю. А. Золотова .— М. : Мир : АСТ, 2004 .— (Лучший зарубежный учебник) .— ISBN 5-03-003559-1 .— ISBN 5-17-13406-1. Т. 2 / ред. Р. Кельнер [и др.] ; пер. с англ. А. Г. Борзенко [и др.] ; под ред. Ю. А. Золотова .— М. : Мир : АСТ, 2004 .— 728 с. : ил. — Предм. указ. : с. 697-724 .— ISBN 5-03-003561-3 : 0,00 .— ISBN 5-17-021059-0.
 10. Отто, М. Современные методы аналитической химии [Текст] : в 2 т. / М. Отто ; пер. с нем. А. В. Гармаша .— М. : Техносфера, 2003 .— (Мир химии) .— ISBN 5-95836-014-8.
 11. Пентин, Юрий Андреевич. Основы молекулярной спектроскопии [Текст] : учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по специальности 011000 - Химия и направление 510500 - Химия / Ю. А. Пентин, Г. М. Курамшина .— М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008 .— 398 с. : ил. — (Методы в химии) .— Библиогр.: с. 392, 393 .— ISBN 978-5-94774-765-2 .— ISBN 978-5-03-003846-9.
 12. Пентин, Юрий Андреевич. Физические методы исследования в химии [Текст] : учебник для студентов вузов / Ю. А. Пентин, Л. В. Вилков .— М. : Мир, 2006 .— 683 с. : ил. ; 22 .— (Методы в химии) .— На авантит. авт.: Пентин Ю.А., проф., д.х.н., засл. деят. науки РФ и засл. проф. МГУ, Вилков Л.В., проф., д.х.н., засл. деят. науки РФ .— Библиогр.: с. 658-661 .— Предм. указ.: с. 662-673 .— ISBN 5--03-003770-5 : 510,40, 5000.

с) методические указания к практическим занятиям

Задачи по физ. химии: Учеб. пособ. / В. В. Еремин, С. И. Каргов, И. А. Успенская и др. - М.: Экзамен, 2003.- 318 с.

д) периодические издания (научные журналы)

1. Химия и жизнь XXI век
2. Успехи химии
3. Химоко-фармацевтический журнал
4. Российский химический журнал (ЖРХО им. Д.И.Менделеева)
5. Биотехнология
6. Журнал аналитической химии
7. Журнал общей биологии
8. Успехи современной биологии
9. Физиология растений
10. Экология
11. Сибирский экологический журнал

e) перечень лицензионного программного обеспечения

1. Matlab
2. MathCAD
3. OpenFOAM
4. Microsoft Office

f) Интернет-ресурсы

<http://www.springer.com/biomed/pharmacology+%26+toxicology/journal/10600>

Полнотекстовая электронная версия журнала «Chemistry of Natural Compounds» Содержит статьи и обзоры новейших разработок в области химии природных соединений. Статьи представлены в форматах html и pdf с 1965 по 2017 год. Springer <http://ebooks.springerlink.com>

<https://link.springer.com/journal/volumesAndIssues/11171>

Полнотекстовая электронная версия журнала «Russian Journal of Bioorganic Chemistry» Содержит статьи и обзоры новейших разработок в области биоорганической химии. Статьи представлены в форматах html и pdf с 2000 по 2017 год. Springer Link <http://ebooks.springerlink.com>

<http://journal.asu.ru/index.php/cw>

Полнотекстовая электронная версия журнала «Химия растительного сырья» Содержит статьи и обзоры новейших разработок в области химии растительного сырья. Статьи представлены в форматах html и pdf с 1997 по 2017 год. Алтайский государственный университет.

Коллекция полнотекстовых электронных книг на иностранных языках издательства Springer Журналы Американского химического общества <http://pubs.acs.org>

Полнотекстовые электронные журналы на английском языке издательства American Chemical Society (ACS) <http://www.chem.msu.su/rus/welcome.html>

База данных ВИНТИ по естественным, точным и техническим наукам. Реферативная база данных Всероссийского института научной и технической информации отражает материалы периодических изданий, книг, материалы конференций, тезисов, патентов, нормативных документов, депонированных научных работ.

1. <http://www.rusanalytchem.org/>
2. <http://www.anchem.ru/>
3. <http://www.chem.msu.ru/>
4. <http://pubs.acs.org/>
5. <http://www.sciencedirect.com/>
6. <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>
7. <http://www.chemport.ru/>
8. <http://wwwsoc.nii.ac.jp/>
9. <http://springerlink.metapress.com/>
10. <http://phase.imet.ac.ru/zavlabor/>
11. <http://www.uspkhim.ru/>
12. <http://pubs.acs.org>

6.1. СОВРЕМЕННЫЕ ПРОФЕССИОНАЛЬНЫЕ БАЗЫ ДАННЫХ (В ТОМ ЧИСЛЕ МЕЖДУНАРОДНЫЕ РЕФЕРАТИВНЫЕ БАЗЫ ДАННЫХ)

Национальная электронная библиотека нэб.рф

Правообладатель: Федеральное государственное бюджетное учреждение «Российская государственная библиотека».

Договор о подключении №101/НЭБ/0442-п от 2.04.2018 г., доступ предоставлен с 1.01.2018 г. и бессрочно.

Национальная электронная библиотека (НЭБ) — представленный единым порталом и поисковой системой проект, цель которого — свободный доступ читателей к фондам российских библиотек. На портале представлены электронные копии книг и библиографические записи федеральных и региональных библиотек России. Издания посвящены самой разной тематике и относятся к широкому набору жанров. В оцифрованном виде можно найти как древние рукописи, так и самые последние научные и художественные произведения. Часть книг находится в свободном доступе, часть защищена авторским правом.

Условия доступа: со всех компьютеров библиотеки.

Электронная библиотека диссертаций <https://dvs.rsl.ru/>

Правообладатель: ФГБУ «Российская государственная библиотека».

Договор №095/04/0164-101-17д-607 от 25.09.2017 г., доступ предоставлен с 23.11.2017 г. до 22.11.2018 г.

Электронная библиотека диссертаций Российской государственной библиотеки содержит около 900 тыс. полных текстов диссертаций и авторефератов по всем специальностям, Пополнение базы новыми документами происходит по мере их оцифровки (около 25000 диссертаций в год).

Каталог Электронной библиотеки диссертаций РГБ находится в свободном доступе для любого пользователя сети Интернет. Просмотр полнотекстовых электронных версий возможен только с компьютеров НБ Сургу по логину и паролю. Для этого читателю необходимо самостоятельно заполнить анкету на странице регистрации в виртуальном читальном зале (ВЧЗ). После заполнения и отправки анкеты на регистрацию надо обратиться к библиотекарю-консультанту зала электронных ресурсов с просьбой подтвердить регистрацию читателя и прикрепить его в ВЧЗ.

Научная электронная библиотека (eLIBRARY.RU) <http://www.elibrary.ru>

Правообладатель: ООО «Научная электронная библиотека».

Договор № СИО-641/2017/02-16Д-308 от 19.05.2017 г., доступ предоставлен с 28.07.2017 г. до 29.07.2018 г.

Универсальная eLIBRARY.RU – крупнейшая в России электронная библиотека научных публикаций, обладающая богатыми возможностями поиска и получения информации. Содержит полнотекстовые версии иностранных и отечественных научных журналов, рефераты публикаций журналов, а также описания зарубежных и российских диссертаций. Свыше 2800 российских научных журналов размещены в бесплатном открытом доступе. Для доступа к остальным изданиям предлагается возможность подписаться или заказать отдельные публикации. Библиотека интегрирована с Российским индексом научного цитирования (РИНЦ).

Российская национальная библиотека

http://primo.nlr.ru/primo_librarylibweb/action/search.do?menuitem=ucatalog=true

Коллекции Электронных изданий Российской национальной библиотеки

Scopus <http://www.scopus.com>

Правообладатель: ООО «Эко-вектор Ай - Пи».

Контракт №387200022317000253-0288756-01 от 13.12.2017г. доступ предоставлен с 1.11.2017г. до 31.10.2018 г.

Scopus – универсальная реферативная база данных, содержащая аннотации и информацию о цитируемости рецензируемой литературы со встроенными библиометрическими механизмами отслеживания, анализа и визуализации данных. В базе

содержится более 21900 изданий от 5000 международных издателей в области фундаментальных, общественных и гуманитарных наук, техники, медицины и искусства.

Доступ в локальной сети университета

Springer

Springer международная издательская компания, специализирующаяся на выпуске академических журналов и книг по естественнонаучным направлениям.

Ресурсы: Springer Journals — полнотекстовая коллекция электронных журналов издательства Springer по различным отраслям знаний.

Springer Protocols — коллекция научных протоколов по различным отраслям знаний.

Springer Materials — коллекция научных материалов в области физических наук и инжиниринга.

Springer Reference — электронные энциклопедии, справочники, словари и атласы по всем отраслям науки.

zbMATH — реферативная база данных по чистой и прикладной математике. Условия доступа: по IP адресам СурГУ.

Web of Science

<http://webofknowledge.com>

Правообладатель: НП «НЭИКОН»

Контракт №01-18ГК222 от 18.05.2018г. доступ предоставлен с 1.04.2018-31.12.2018г.

Контракт №01-07Д-614 от 8.11.2017 г., доступ предоставлен с 1.1.2017 г. до 31.10.2018 г.

Web of Science (WoS) — поисковая платформа, объединяющая реферативные базы данных публикаций в научных журналах, в том числе базы, учитывающие взаимное цитирование публикаций. WoS охватывает материалы по естественным, техническим, общественным, гуманитарным наукам и искусству. Платформа обладает встроенными возможностями поиска, анализа и управления библиографической информацией.

По подписке доступны следующие базы данных:

Web of Science Core Collection, включая все индексы научного цитирования:

Science Citation Index Expanded (1975-по настоящее время)

Social Sciences Citation Index (1975-по настоящее время)

Arts & Humanities Citation Index (1975-по настоящее время)

Conference Proceedings Citation Index- Science (1990-по настоящее время)

Conference Proceedings Citation Index- Social Science & Humanities (1990-по настоящее время) Book Citation Index— Science (2005-по настоящее время)

Book Citation Index— Social Sciences & Humanities (2005-по настоящее время) Emerging Sources Citation Index (2015-по настоящее время).

Russian Science Citation Index — доступ к библиографической информации и цитированию научных статей российских исследователей в более 500 научных, технических, медицинских и образовательных журналах (2005 по настоящее время).

InCites — аналитический профиль для исследований и сравнений.

С информацией по работе с данными ресурсами можно ознакомиться на информационном портале wokinfo.com (на английском языке) или wokinfo.com/russian (на русском языке). Дополнительная информация и видео-уроки доступны на каналах YouTube: [youtube.com/user/WoSTraining](https://www.youtube.com/user/WoSTraining) (на английском языке) или [youtube.com/woktrainingsrussian](https://www.youtube.com/woktrainingsrussian) (на русском языке).

Условия доступа: по IP адресам в локальной сети СурГУ с дальнейшей регистрацией, которая дает возможность удаленного доступа к ресурсу.

6.2. ИНФОРМАЦИОННО-СПРАВОЧНЫЕ СИСТЕМЫ

Евразийская патентная информационная система (ЕАПАТИС)

<http://www.eapatis.com>

Правообладатель: ФС по интеллектуальной собственности ФГБУ "ФИПС".

Письмо исх. № 2014-01/29, доступ предоставлен бессрочно.

Система ЕАПАТИС разработана Евразийским патентным ведомством (ЕАПВ) и является информационно-поисковой системой, обеспечивающей доступ к мировым, региональным и национальным фондам патентной документации. Русскоязычный фонд представлен в ЕАПАТИС патентной документацией ЕАПВ, России, национальных патентных ведомств стран евразийского региона, включая документацию стран-участниц Евразийской патентной конвенции. Предусмотрены различные виды патентных поисков. В результате проведения поиска формируются списки найденных патентных документов и предоставляются их реферативно-библиографические описания.

Условия доступа: по логину и паролю.

Единое окно доступа к образовательным ресурсам - информационная система

<http://window.edu.ru/> Универсальная

Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам» создана по заказу Федерального агентства по образованию в 2005-2008 гг. Целью создания информационной системы «Единое окно доступа к образовательным ресурсам» (ИС «Единое окно») является обеспечение свободного доступа к интегральному каталогу образовательных интернет-ресурсов, к электронной библиотеке учебно-методических материалов для общего и профессионального образования и к ресурсам системы федеральных образовательных порталов. В разделе Библиотека представлено более 27 000 учебно-методических материалов, разработанных и накопленных в системе федеральных образовательных порталов, а также изданных в университетах, ВУЗах и школах России. Все электронные копии учебно-методических материалов были размещены в «Библиотеке» с согласия университетов, издательств и авторов или перенесены с порталов и сайтов, владельцы которых не возражают против некоммерческого использования их ресурсов. В Каталоге хранится более 54 000 описаний образовательных интернет-ресурсов, систематизированных по дисциплинам профессионального и предметам общего образования, типам ресурсов, уровням образования и целевой аудитории. В ИС «Единое окно» предусмотрена единая система рубрикации, возможен как совместный, так и отдельный поиск по ресурсам «Каталога» и «Библиотеки».

УИС РОССИЯ <http://uisrussia.msu.ru> Универсальная

Университетская информационная система РОССИЯ включает коллекции законодательных и нормативных документов, статистику Госкомстата и Центризбиркома России, издания средств массовой информации, материалы исследовательских центров, научные издания и т. д. Доступ к аннотациям и частично полным текстам документов (свободный доступ) можно получить с любого компьютера. Для этого необходимо зарегистрироваться на сайте и получить пароль.

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ МОДУЛЯ

Учебная лаборатория № 122 оборудована комплектом электропитания ЩЭ (220 В, 2 кВт) в комплекте с УЗО, горячим и холодным водоснабжением, канализацией, деревянными лабораторными столами на металлических ножках и такими же стульями на 16 рабочих мест, доской для написания мелом, четырьмя вытяжными шкафами с принудительной вентиляцией, подводкой электроосвещения, электропитания, воды и канализации, вакуумным насосом с системой очистки, столом и стулом для преподавателя, дополнительными столами для хранения сумок, лабораторными шкафами для хранения реактивов, посуды, электронными таблицами элементов и растворимости солей, набором плакатов,

средствами пожаротушения и первой помощи, переносным мультимедийным проектором, сушильным шкафом ПЭ-610, электронными весами ВЛЭ-250 (4), электронными аналитическими весами ACCULABLA-110 (1), муфельной печью МИМП-3П, плитками электрическими с закрытой спиралью (6), кондуктометрами АНИОН (4), газоанализаторами (2), дистиллятором ДЭ-10, аппаратом для получения воды ОСЧ «Водолей», фотоэлектроколориметром КФК-2 (4) и КФК-3 (4), рН-метрами и иономерами (6), поляриметром портативным П-161 М (1), магнитными мешалками (7), спектрофотометрами СФ-46 (2), спектрофотометром регистрирующим СФ-2000, ИК-Фурье спектрометром Spectrum 100, газовым хроматографом с ПИД фирмы Хроматек-Кристалл 2000 М, прибором для ТСХ с облучателем хроматографическим - УФС 254/365 УСП-1М, ПОЖ-2, микродозаторами, набором лабораторной посуды: стаканы (10-500 мл), колбы конические (50-500 мл), колбы мерные (100-1000 мл), цилиндры мерные (10-500), пипетки Мора, пипетки мерные, бюретки, капельницы, бюксы, чашки Петри, фарфоровые чашки и ступки с пестиком, промывалки, бутылки Вульфа, фарфоровые тигли, воронки стеклянные (d 50-150 мл), воронки делительные (100-2000 мл), эксикаторы в достаточном количестве, часовые стекла d 30, 50, 100 мм.

8. ОСОБЕННОСТИ ОСВОЕНИЯ МОДУЛЯ АСПИРАНТАМИ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

В соответствии с ч.4 «Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре) (утв. приказом Министерства образования и науки РФ от 19 ноября 2013 г. № 1259) для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья предлагается адаптированная программа аспирантуры, которая осуществляется с учетом особенностей психофизического развития, индивидуальных возможностей и состояния здоровья таких обучающихся. Для обучающихся-инвалидов программа адаптируется в соответствии с индивидуальной программой реабилитации инвалида.

Специальные условия для получения высшего образования по программе аспирантуры обучающимися с ограниченными возможностями здоровья включают:

- использование специальных образовательных программ и методов обучения и воспитания, включая наличие альтернативной версии официального сайта организации в сети «Интернет» для слабовидящих;
- использование специальных учебников, учебных пособий и дидактических материалов, включая альтернативные форматы печатных материалов (крупный шрифт или аудиофайлы);
- использование специальных технических средств обучения коллективного и индивидуального пользования, включая установку мониторов с возможностью трансляции субтитров, обеспечение надлежащими звуковыми средствами воспроизведения информации;
- предоставление услуг ассистента, оказывающего обучающимся необходимую техническую помощь или услуги сурдопереводчиков/тифлосурдопереводчиков;
- проведение групповых и индивидуальных коррекционных занятий;
- обеспечение беспрепятственного доступа обучающихся в учебные помещения, столовые, туалетные и другие помещения организации, а также пребывания в указанных помещениях (наличие пандусов, поручней, расширенных дверных проемов, лифтов, локальное понижение стоек-барьеров; наличие специальных кресел и других приспособлений).

8. ОСОБЕННОСТИ ОСВОЕНИЯ МОДУЛЯ АСПИРАНТАМИ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

В соответствии с ч.4 «Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре) (утв. приказом Министерства образования и науки РФ от 19 ноября 2013 г. № 1259) для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья предлагается адаптированная программа аспирантуры, которая осуществляется с учетом особенностей психофизического развития, индивидуальных возможностей и состояния здоровья таких обучающихся. Для обучающихся-инвалидов программа адаптируется в соответствии с индивидуальной программой реабилитации инвалида.

Специальные условия для получения высшего образования по программе аспирантуры обучающимися с ограниченными возможностями здоровья включают:

- использование специальных образовательных программ и методов обучения и воспитания, включая наличие альтернативной версии официального сайта организации в сети «Интернет» для слабовидящих;

- использование специальных учебников, учебных пособий и дидактических материалов, включая альтернативные форматы печатных материалов (крупный шрифт или аудиофайлы);

- использование специальных технических средств обучения коллективного и индивидуального пользования, включая установку мониторов с возможностью трансляции субтитров, обеспечение надлежащими звуковыми средствами воспроизведения информации;

- предоставление услуг ассистента, оказывающего обучающимся необходимую техническую помощь или услуги сурдопереводчиков/тифлосурдопереводчиков;

- проведение групповых и индивидуальных коррекционных занятий;

- обеспечение беспрепятственного доступа обучающихся в учебные помещения, столовые, туалетные и другие помещения организации, а также пребывания в указанных помещениях (наличие пандусов, поручней, расширенных дверных проемов, лифтов, локальное понижение стоек-барьеров; наличие специальных кресел и других приспособлений).

**БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
Ханты-Мансийского автономного округа –Югры
«Сургутский государственный университет»**

ФОНДЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ
Приложение к рабочей программе по модулю

**«Дисциплина /дисциплины (модули), в том числе направленные на
подготовку к сдаче кандидатских экзаменов»**

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки

Направленность программы:
Физическая химия

Отрасль науки:
Химические науки

Квалификация:
Исследователь. Преподаватель-исследователь

Форма обучения:
очная

Сургут, 2018 г.

Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы

ОПК-1

способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий		
Знает	Умеет	Владеет
достижения структурного анализа, изучения свойств и создания модельных систем для исследования физико-химических процессов	в рамках поставленной задачи самостоятельно планировать экспериментальную работу,	современными методами математической и статистической обработки экспериментальных данных;

ПК-2

способностью экспериментально определять термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов		
Знает	Умеет	Владеет
термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов	определять термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов	навыками экспериментального определения термодинамические свойства веществ, расчета термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов

ПК-3

способностью определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями		
Знает	Умеет	Владеет
способы определения и расчета параметров строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями	определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями	навыками определения и расчета параметров строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями

ПК-4

способностью определять термодинамические характеристики процессов на поверхности, владением закономерностями адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях		
--	--	--

Знает	Умеет	Владеет
термодинамические характеристики процессов на поверхности, закономерности адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях	определять термодинамические характеристики процессов на поверхности, закономерности адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях	навыками определения термодинамические характеристики процессов на поверхности, закономерностей адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях

ПК-5

способностью определять механизмы сложных химических процессов, владеть законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий		
Знает	Умеет	Владеет
механизмы сложных химических процессов, владеть законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий	определять механизмы сложных химических процессов, владеть законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий	навыками определения механизмы сложных химических процессов, владеть законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий

УК-1

способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях		
Знает	Умеет	Владеет
основные достижения и тенденции развития физической химии	интерпретировать результаты эксперимента на основе современного научного знания, делать заключение на основе полученных экспериментальных данных	основными методами химических и физико-химических анализов

Этап: Проведение промежуточной аттестации

Результаты текущего контроля знаний оцениваются по четырехбалльной шкале с оценками: «отлично»; «хорошо»; «удовлетворительно»; «неудовлетворительно».

Дескриптор	Показатель оценивания	Оценка	Критерий оценивания
------------	-----------------------	--------	---------------------

компетенции			
Знает	<p>достижения структурного анализа, изучения свойств и создания модельных систем для исследования физико-химических процессов, термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов, способы определения и расчета параметров строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями, термодинамические характеристики процессов на поверхности, закономерности адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях, механизмы сложных химических процессов, владеть законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий,</p>	Отлично	Аспирант должен безошибочно ответить на все вопросы, представленные в билете, а также продемонстрировать свободное владение материалом при ответе на дополнительные вопросы.
		Хорошо	Аспирант должен безошибочно ответить на вопросы, представленные в билете, но не точно или не в полном объеме раскрывать дополнительно заданные вопросы.
		Удовлетворительно	Аспирант затрудняется в ответах на вопросы билета, отвечает только после наводящих вопросов, демонстрирует слабое знание при ответе на дополнительные вопросы.
		Неудовлетворительно	Аспирант продемонстрировал слабые знания при ответе на вопросы, сформулированные в билете, не ответил ни на один из дополнительных вопросов.

	основные достижения и тенденции развития физической химии.		
Умеет	в рамках поставленной задачи самостоятельно планировать экспериментальную работу, определять термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов, определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями, определять термодинамические характеристики процессов на поверхности, закономерности адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях, определять механизмы сложных химических процессов, владеть законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации,	Отлично	Студент легко ориентируется в вопросах самостоятельной постановки задач по физической химии, выбирает оптимальные пути и методы ее решения, обсуждает результаты исследований, может вести научную дискуссию.
		Хорошо	Аспирант должен безошибочно ответить на все вопросы, представленные в билете, а также продемонстрировать свободное владение материалом при ответе на дополнительные вопросы.
		Удовлетворительно	Аспирант должен безошибочно ответить на вопросы, представленные в билете, но не точно или не в полном объеме раскрывать дополнительно заданные вопросы.
		Неудовлетворительно	Аспирант затрудняется в ответах на вопросы билета, отвечает только после наводящих вопросов, демонстрирует слабое знание при ответе на дополнительные вопросы.

	теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий, интерпретировать результаты эксперимента на основе современного научного знания, делать заключение на основе полученных экспериментальных данных.		
Владеет	современными методами математической и статистической обработки экспериментальных данных, навыками экспериментального определения термодинамические свойства веществ, расчета термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов, навыками определения и расчета параметров строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями, навыками определения термодинамические характеристики процессов на поверхности, закономерностей адсорбции на границе раздела фаз и	Отлично	Аспирант должен безошибочно ответить на все вопросы, представленные в билете, а также продемонстрировать свободное владение материалом при ответе на дополнительные вопросы.
		Хорошо	Аспирант должен безошибочно ответить на вопросы, представленные в билете, но не точно или не в полном объеме раскрывать дополнительно заданные вопросы.
		Удовлетворительно	Аспирант затрудняется в ответах на вопросы билета, отвечает только после наводящих вопросов, демонстрирует слабое знание при ответе на дополнительные вопросы.
		Неудовлетворительно	Аспирант продемонстрировал слабые знания при ответе на вопросы, сформулированные в билете, не ответил ни на один из дополнительных вопросов.

	<p>формирования активных центров на таких поверхностях, навыками определения механизмы сложных химических процессов, владеть законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий, основными методами химических и физико-химических анализов.</p>		
--	---	--	--

Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

Этап: проведение текущего контроля успеваемости по дисциплине

Дисциплина 1 «Физическая химия»

Раздел 1. Химическая термодинамика

Вопросы для устного опроса:

1. Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, интенсивные и экстенсивные переменные.
2. Первый закон термодинамики. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия, теплоемкость.
3. Закон Гесса. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгофа.
4. Второй закон термодинамики. Энтропия и ее изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно - Клаузиуса.
5. Уравнение Гиббса - Гельмгольца. Работа и теплота химического процесса. Химические потенциалы.

Расчетные задачи для решения:

1. Используя инкрементную схему, рассчитайте значение изобарной теплоемкости *изо*-бутилацетата при 293 К.
Величины некоторых групповых вкладов изобарных теплоемкостей (T=293 К)

Атом или группа	C_p , Дж·моль ⁻¹ ·К ⁻¹	Атом или группа	C_p , Дж·моль ⁻¹ ·К ⁻¹
-CH ₃	41.32	-O-	35.02
-CH ₂ -	26.45	-NH ₂	63.3
-CN	58.16	-COOH	79.90
-C ₆ H ₅	127.61	-COO·	60.75
-CH-	22.69	-C=O	61.5

2. Рассчитайте энтальпию сгорания метана при 1000К, если даны энтальпии образования при 298 К: $\Delta_f H(\text{CH}_4) = -17,9$ ккал·моль⁻¹, $\Delta_f H(\text{CO}_2) = -94,1$ ккал·моль⁻¹, $\Delta_f H(\text{H}_2\text{O}_{(г)}) = -57,8$ ккал·моль⁻¹.

Теплоемкости газов (в ккал·моль⁻¹·К⁻¹) в интервале от 298 до 1000 К равны:

$$C_p(\text{CH}_4) = 3,422 + 0,0178 \cdot T, \quad C_p(\text{O}_2) = 6,095 + 0,0033 \cdot T,$$

$$C_p(\text{CO}_2) = 6,396 + 0,0102 \cdot T, \quad C_p(\text{H}_2\text{O}_{(г)}) = 7,188 + 0,0024 \cdot T.$$

Вывод: выполнение заданий по данной теме позволяет оценить сформированность части следующей компетенции: ПК-2 – способностью экспериментально определять термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов; ПК-3 – способностью определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями;

Раздел 2. Химическое равновесие

Вопросы для устного опроса:

1. Химическое равновесие. Закон действующих масс.
2. Различные виды констант равновесия и связь между ними.
3. Изотерма Вант-Гоффа.
4. Уравнения изобары и изохоры химической реакции. Расчеты констант равновесия химических реакций.
5. Приведенная энергия Гиббса и ее использование для расчетов химических равновесий. Равновесие в поле внешних сил. Полные потенциалы.

Расчетные задачи для решения:

1. Приведите пример обратимого, но неравновесного термодинамического процесса.
2. Рассчитайте изменение энтропии 1000г воды в результате ее замерзания при -5°С. Теплота плавления льда при 0°С равна 6008 Дж·моль⁻¹. Теплоемкости льда и воды равны 34,7 и 75,3 Дж·моль⁻¹ К⁻¹, соответственно. Объясните, почему энтропия при замерзании уменьшается, хотя процесс-самопроизвольный.

Вывод: выполнение заданий по данной теме позволяет оценить сформированность части следующей компетенции: ПК-2 – способностью экспериментально определять термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов; ПК-3 – способностью определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями;

Раздел 3. Растворы. Фазовые равновесия.

Вопросы для устного опроса:

1. Растворы. Фазовые равновесия. Различные типы растворов. Способы выражения состава растворов.
2. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов.
3. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля.
4. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение.
5. Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонент растворов. Симметричная и несимметричная системы отсчета.

Расчетные задачи для решения:

1. Температура кипения бензола при давлении 1 атм равна 80,1°C. Оцените давление пара бензола при 25°C.

Ключ правильных ответов

1	2	3	4	5
233,85 Дж·моль ⁻¹ ·К ⁻¹	-192,5 ккал·моль ⁻¹	сверхпроводимость сверхтекучесть	-1181 Дж·К ⁻¹	0,141 атм

2. Рассчитайте состав раствора бензол-толуол, который при нормальном давлении кипит при температуре 100°C, а также состав образующегося пара. Раствор считайте идеальным, Давления пара чистых бензола и толуола при 100°C равны 1350 Торр и 556 Торр, соответственно.

Вывод: выполнение заданий по данной теме позволяет оценить сформированность части следующей компетенции: ПК-2 – способностью экспериментально определять термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов; ПК-3 – способностью определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями;

Раздел 4. Адсорбция и поверхностные явления

Вопросы для устного опроса:

1. Адсорбция и поверхностные явления. Адсорбция. Адсорбент, адсорбат. Виды адсорбции.
2. Структура поверхности и пористость адсорбента. Локализованная и делокализованная адсорбция.
3. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Динамический характер адсорбционного равновесия.
4. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри.
5. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Лэнгмюра.

Вывод: выполнение заданий по данной теме позволяет оценить сформированность части следующей компетенции: ПК-2 – способностью экспериментально определять термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов; ПК-3 – способностью определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями;

Раздел 5. Электрохимические процессы

Вопросы для устного опроса:

1. Растворы электролитов. Ион-дипольное взаимодействие как основной процесс, определяющий устойчивость растворов электролитов. Коэффициенты активности в растворах электролитов.
2. Средняя активность и средний коэффициент активности, их связь с активностью отдельных ионов. Основные положения теории Дебая - Хюккеля.
3. Потенциал ионной атмосферы. Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз в электрохимической цепи.
4. Термодинамика гальванического элемента. Электродвижущая сила, ее выражение через энергию Гиббса реакции в элементе.
5. Уравнения Нернста и Гиббса - Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи. Понятие электродного потенциала.

Вывод: выполнение заданий по данной теме позволяет оценить сформированность части следующей компетенции: ПК-2 – способностью экспериментально определять термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов; ПК-3 – способностью определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями;

Раздел 6. Химическая кинетика. Катализ

Вопросы для устного опроса:

1. Основной постулат химической кинетики. Способы определения скорости реакции. Кинетические кривые. Кинетические уравнения.
2. Константа скорости и порядок реакции. Реакции переменного порядка.
3. Феноменологическая кинетика сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций.
4. Кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса - Ментен. Цепные реакции.
5. Реакции в потоке. Реакции идеального вытеснения и идеального смешения. Колебательные реакции.
6. Классификация каталитических реакций и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия.
7. *Гомогенный катализ.* Кислотно-основной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Бренстеда.
8. Корреляционные уравнения для энергий активации и теплот реакций. Специфический и общий основной катализ. Нуклеофильный и электрофильный катализ.
9. Катализ металлокомплексными соединениями. Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы. Ферментативный катализ.
10. *Гетерогенный катализ.* Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Удельная и атомная активность. Селективность катализаторов.

Расчетные задачи для решения:

1. Рассчитайте константу равновесия для реакции
 - a. $\text{CO}_{(г)} + 2\text{H}_{2(г)} = \text{CH}_3\text{OH}_{(г)}$
 - b. При 500 К. $\Delta_f G^\circ$ для $\text{CO}_{(г)}$ и $\text{CH}_3\text{OH}_{(г)}$ при 500 К равны $-155,41 \text{ кДж}\cdot\text{моль}^{-1}$ и $-134,20 \text{ кДж}\cdot\text{моль}^{-1}$, соответственно.

2. При 312 К и давлении 1,21 Торр на поверхности микропористого глинистого адсорбента сорбируется 1,37 моль·кг⁻¹ паров метилового спирта. Такая же адсорбция достигается при повышении температуры до 320 К и увеличении давления до 3,16 Торр. Вычислите энтальпию адсорбции метилового спирта при данной степени заполнения поверхности.
3. Молекула может находиться на двух уровнях с энергиями 0 и 300 см⁻¹. Какова вероятность того, что молекула будет находиться на верхнем уровне при 250°C?

Вывод: выполнение заданий по данной теме позволяет оценить сформированность части следующей компетенции: ПК-2 – способностью экспериментально определять термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов; ПК-3 – способностью определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями;

Дисциплина 2 «Спектроскопические методы исследований»

Раздел 1. Основные понятия и определения. Теоретические основы спектроскопии.

Задания для тестового контроля:

01. В основе спектрофотометрических методов лежит
 - 1) избирательное поглощение электромагнитного излучения анализируемым веществом
 - 2) испускание электромагнитного излучения возбужденными атомами или молекулами
 - 3) отражение электромагнитного излучения анализируемым веществом
02. Поглощение электромагнитного излучения веществом зависит от
 - 1) интенсивности светового потока
 - 2) природы вещества
 - 3) толщины поглощающего слоя
 - 4) содержания вещества в анализируемом растворе
03. Спектр поглощения в УФ – области представляет собой
 - 1) графическую зависимость оптической плотности (D) или молярного коэффициента поглощения (ϵ) от длины волны (λ) падающего света
 - 2) графическую зависимость пропускания (T) от частоты (ν), выраженной в обратных сантиметрах
06. Картина спектра в УФ-области зависит от
 - 1) массы атомов и действующих между ними сил
 - 2) числа атомов и числа образованных между ними связей
 - 3) наличия в структуре системы сопряженных связей
08. Полосы поглощения в спектре в УФ-области характеризуются
 - 1) расположением аналитических длин волн λ_{\max} λ_{\min}
 - 2) положением в аналитической области спектра всего набора полос поглощения
 - 3) интенсивностью поглощения, выраженной через удельный показатель поглощения ($E^{1\%1\text{см}}$)
 - 4) относительной интенсивностью, характеризуемой как малой, средней и высокой степени

Вывод: выполнение заданий по данной теме позволяет оценить сформированность части следующей компетенции: ОПК-1 – способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных

технологий; ПК-3 – способностью определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями; УК-1 – способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.

Раздел 2. Методы атомной спектроскопии.

Задания для тестового контроля:

01. В основе спектрофотометрических методов лежит

- 1) избирательное поглощение электромагнитного излучения анализируемым веществом
- 2) испускание электромагнитного излучения возбужденными атомами или молекулами
- 3) отражение электромагнитного излучения анализируемым веществом

05. Установите соответствие

Область	Характер спектра электромагнитного излучения
1) УФ-область	а) колебательный
2) ИК-область	б) электронный

06. Картина спектра в УФ-области зависит от

- 1) массы атомов и действующих между ними сил
- 2) числа атомов и числа образованных между ними связей
- 3) наличия в структуре системы сопряженных связей

11. Более селективным и информативным для целей определения подлинности веществ является

- а) спектрофотометрия в УФ-области
- б) спектрофотометрия в ИК-области

15. Чувствительность определения выше, а погрешность измерения величины поглощения меньше

- 1) в УФ-области
- 2) в ИК-области

16. В количественном анализе веществ используется чаще

- 1) спектрофотометрия в УФ-области
- 2) спектрофотометрия в ИК-области

Вывод: выполнение заданий по данной теме позволяет оценить сформированность части следующей компетенции: ОПК-1 – способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий; ПК-3 – способностью определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями; УК-1 – способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.

Раздел 3. Методы молекулярной спектроскопии.

Задания для тестового контроля:

04. Спектр поглощения в ИК – области представляет собой

- 1) графическую зависимость оптической плотности (D) или молярного коэффициента поглощения (ϵ) от длины волны (λ) падающего света
- 2) графическую зависимость пропускания (T) от частоты (ν), выраженной в обратных сантиметрах

07. Картина спектра в ИК-области зависит от

- 1) массы атомов и действующих между ними сил
- 2) числа атомов и числа образованных между ними связей
- 3) наличия в структуре системы сопряженных связей

08. Полосы поглощения в спектре в УФ-области характеризуются

- 1) расположением аналитических длин волн λ_{\max} λ_{\min}
- 2) положением в аналитической области спектра всего набора полос поглощения
- 3) интенсивностью поглощения, выраженной через удельный показатель поглощения ($E^{1\%}_{1\text{см}}$)
- 4) относительной интенсивностью, характеризуемой как малой, средней и высокой степени

09. Полосы поглощения в спектре в ИК-области характеризуются

- 1) расположением аналитических длин волн λ_{\max} λ_{\min}
- 2) положением в аналитической области спектра всего набора полос поглощения
- 3) интенсивностью поглощения, выраженной через удельный показатель поглощения ($E^{1\%}_{1\text{см}}$)
- 4) относительной интенсивностью, характеризуемой как малой, средней и высокой степени

10. Установите соответствие

Область ИК-спектра	Аналитическая информация
1) область 1300 - 400 см^{-1}	а) характеристика ядерного скелета
2) область 4000 - 1300 см^{-1}	молекулы в целом
	область «отпечатков пальцев»
	б) характеристика входящих в состав
	молекулы функциональных групп
	«характеристическая область»

11. Более селективным и информативным для целей определения подлинности веществ является

- а) спектрофотометрия в УФ-области
- б) спектрофотометрия в ИК-области

12. Идентификация вещества по ИК-спектрам может быть проведена

- 1) по совпадению полос поглощения и относительных интенсивностей со спектром стандартного образца
- 2) по совпадению полос поглощения и относительной интенсивности с рисунком спектра, приведенным в библиотеке
- 3) по положению и интенсивностям аналитических длин волн в литературе

13. При испытании на подлинность лекарственных веществ УФ-спектрофотометрический метод рассматривается как

- 1) основной
- 2) дополнительный

14. Определение подлинности лекарственных веществ УФ-спектрофотометрическим методом может быть осуществлено

- 1) по спектральной кривой

- 2) по калибровочному графику
- 3) по величине удельного показателя поглощения при аналитической длине волны

15. Чувствительность определения выше, а погрешность измерения величины поглощения меньше

- 1) в УФ-области
- 2) в ИК-области

16. В количественном анализе веществ используется чаще

- 1) спектрофотометрия в УФ-области
- 2) спектрофотометрия в ИК-области

17. Подготовка образца для количественного УФ-спектрофотометрического определения предполагает

- 1) взятие макронавески вещества с последующим ее растворением и разбавлением соответствующим растворителем с использованием мерных колб
- 2) растирание вещества с вазелиновым маслом или другой жидкостью и помещение полученной суспензии между двумя пластинками из калия бромида
- 3) растирание вещества с калия бромидом и последующее прессование

18. Выбор концентрации раствора анализируемого вещества в УФ-спектрофотометрических определениях осуществляют

- 1) по спектральной кривой
- 2) по калибровочному графику
- 3) исходя из концентрации стандартного раствора

19. В методике количественного определения веществ УФ-спектрофотометрическим методом должны быть регламентированы

- 1) величина макронавески
- 2) мерная посуда для разведения навески
- 3) концентрация раствора анализируемого вещества
- 4) концентрация стандартного раствора или способ его приготовления
- 5) аналитическая длина волны
- 6) раствор сравнения

Вывод: выполнение заданий по данной теме позволяет оценить сформированность части следующей компетенции: ОПК-1 – способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий; ПК-3 – способностью определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями; УК-1 – способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.

Раздел 4. Люминесцентные методы

Задания для тестового контроля:

20. При снижении температуры интенсивность фотолюминесценции

- 1) снижается

- 2) возрастает
- 3) не зависит от температуры

21. При снижении температуры ширина полосы люминесценции

- 1) уменьшается
- 2) увеличивается
- 3) не зависит от температуры

22. При увеличении концентрации люминофора в растворе интенсивность люминесценции

- 1) снижается
- 2) возрастает
- 3) сначала возрастает, затем падает

Вывод: выполнение заданий по данной теме позволяет оценить сформированность части следующей компетенции: ОПК-1 – способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий; ПК-3 – способностью определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями; УК-1 – способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.

Раздел 5. Лазерная спектроскопия

Текущий контроль проводится в форме устного опроса.

Вопросы для контроля по теме 5:

1. Принцип генерации и свойства лазерного излучения.
2. Лазеры как источники возбуждения, их преимущества перед традиционными источниками.
3. Применение лазеров в традиционных методах аналитической химии.
4. Дистанционные методы анализа.

Вывод: выполнение заданий по данной теме позволяет оценить сформированность части следующей компетенции: ОПК-1 – способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий; ПК-3 – способностью определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями; УК-1 – способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.

Раздел 6. Мессбауэровская и рентгеновская спектроскопия

Задания для тестового контроля:

23. Спектр рентгеновской люминесценции химических элементов определяется

- 1) валентным состоянием элемента
- 2) типом химической связи
- 3) строением внутренних электронных оболочек атома или иона

24. Достоинством рентгенофлуоресцентных методов анализа является

- 1) возможность упрощения пробоподготовки
- 2) возможность многоэлементного анализа в рамках одного эксперимента
- 3) возможность проведения неразрушающего анализа

Вывод: выполнение заданий по данной теме позволяет оценить сформированность части следующей компетенции: ОПК-1 – способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий; ПК-3 – способностью определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями; УК-1 – способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.

Дисциплина 3 «Физико-химические методы исследований»

Раздел 1. Электронная УФ спектроскопия

Задания для текущего контроля в форме тестирования:

1. Как связано волновое число ν с длиной волны λ ?

- 1) $\Delta\lambda = -\Delta\nu$
- 2) $\lambda = \nu$
- 3) $\lambda = 1/\nu$;
- 4) $\lambda = c/\nu^3$
- 5) $\lambda = c/\nu$

2. Наибольшая энергия требуется:

- 1) для возбуждения электронов;
- 2) для возбуждения колебаний атомов в молекуле;
- 3) для возбуждения вращений молекулы;
- 4) для переориентации спинов ядер.

3. Каково соотношение между энергиями электронных E_e , колебательных E_v и вращательных E_r состояний молекулы?

- 1) $E_e > E_v > E_r$;
- 2) $E_v > E_r > E_e$;
- 3) $E_r > E_e > E_v$;
- 4) $E_r > E_v > E_e$.

4. При рассмотрении спектров какого типа необходимо учитывать принцип Франка-Кондона?

- 1) ИК-
- 2) вращательных
- 3) КР-
- 4) электронных

5. В каких областях спектра проявляются переходы между электронными, колебательными и вращательными состояниями молекул?

- 1) Колебательные – в ИК-области, вращательные – в УФ-области, электронные – в микроволновой.
- 2) Колебательные – в микроволновой, электронные – в УФ-области, вращательные – в ИК-области.
- 3) Колебательные – в ИК-области, вращательные – в микроволновой, электронные – в УФ-области.

4) Колебательные – в УФ-области, электронные – в ИК-области, вращательные – в микроволновой.

6. Частота валентных колебаний:

- 1) больше чем частота деформационных колебаний
- 2) меньше чем частота деформационных колебаний
- 3) больше чем частота деформационных колебаний одной и той же группы молекулы
- 4) меньше чем частота деформационных колебаний одной и той же группы молекулы

7. Комбинационным рассеянием называется рассеяние света:

- 1) без изменения частоты
- 2) с увеличением частоты
- 3) с уменьшением частоты
- 4) с изменением частоты.

8. В масс-спектрометрии регистрируют

- 1) массы атомов
- 2) массы молекул
- 3) массы элементарных частиц
- 4) отношения массы к заряду ионов

9. Наиболее «мягким» способом ионизации в масс-спектрометрии является

- 1) электронный удар
- 2) химическая ионизация
- 3) фотоионизация
- 4) ионизация в неоднородном электрическом поле (полевая ионизация)

10. Молекулярный ион в масс-спектре – это

- 1) самый интенсивный
- 2) имеющий самую большую массу
- 3) получающийся в результате потери электрона молекулой вещества

11. Изотопный ион в масс-спектре – это

- 1) ион радиоактивного изотопа элемента
- 2) ион наиболее легкого изотопа элемента
- 3) ион наиболее тяжелого изотопа элемента
- 4) ион, содержащий тяжелые изотопы элементов в своем составе

12. Идентификацию веществ по их масс-спектрам осуществляют

- 1) сравнивая экспериментальные масс-спектры эталона и неизвестного вещества
- 2) сравнивая экспериментальный масс-спектр вещества с результатом квантовохимических расчетов
- 3) сравнивая экспериментальный масс-спектр вещества с библиотечным
- 4) на основе эмпирических спектро-структурных корреляций

13. Энергетика процессов, отвечающих за появления спектров, минимальна в

- 1) ИК-спектроскопии
- 2) УФ-спектроскопии
- 3) спин-резонансной спектроскопии
- 4) гамма-резонансной спектроскопии
- 5) рентгеновской спектроскопии

14. Энергетика процессов, отвечающих за появления спектров, максимальна в

- 1) ИК-спектроскопии
- 2) УФ-спектроскопии
- 3) спин-резонансной спектроскопии
- 4) гамма-резонансной спектроскопии
- 5) рентгеновской спектроскопии

15. Спектры ядерного магнитного резонанса можно наблюдать на ядрах

- 1) H^1
- 2) H^2
- 3) C^{12}
- 4) C^{13}
- 5) N^{14}
- 6) N^{15}

16. При фиксированной напряженности магнитного поля резонансное поглощение ядер F^{19} по сравнению с ядрами H^1 наблюдают

- 1) при одинаковой частоте электромагнитного поля
- 2) при меньшей частоте электромагнитного поля
- 3) при большей частоте электромагнитного поля

17. Рентгеновскую флуоресценцию K_α линии золота можно возбудить излучением

- 1) K_α линиями излучения трубки с родиевым анодом
- 2) K_β линиями излучения трубки с родиевым анодом
- 3) излучением коротковолновой части континуума в спектре трубки с родиевым анодом
- 4) невозможно возбудить излучением трубки с родиевым анодом

18. Наблюдение резонансного поглощения в мессбауэровской спектроскопии основано на учете эффекта

- 1) Мессбауэра
- 2) Эйнштейна
- 3) Допплера
- 4) Комптона
- 5) Ньютона

19. При снижении температуры ширина полосы люминесценции

- 1) уменьшается
- 2) увеличивается
- 3) не зависит от температуры

20. Измерять химические сдвиги в спектроскопии ядерного магнитного резонанса принято в

- 1) теслах
- 2) герцах
- 3) относительных единицах
- 4) миллиметрах
- 5) мм/с
- 6) м.д.

21. Измерять химические сдвиги в гамма-резонансной спектроскопии принято в

- 1) теслах
- 2) герцах
- 3) относительных единицах
- 4) миллиметрах
- 5) мм/с
- 6) м.д.

22. Спектр рентгеновской люминесценции химических элементов определяется

- 1) валентным состоянием элемента
- 2) типом химической связи
- 3) строением внутренних электронных оболочек атома или иона

23. Достоинством рентгенофлуоресцентных методов анализа является

- 1) возможность упрощения пробоподготовки
- 2) возможность многоэлементного анализа в рамках одного эксперимента
- 3) возможность проведения неразрушающего анализа

24. Для возбуждения рентгеновской флуоресценции могут быть использованы

- 1) рентгеновские лучи
- 2) гамма-излучение
- 3) поток быстрых нейтральных частиц
- 4) поток быстрых заряженных частиц

Вывод: выполнение заданий по данной теме позволяет оценить сформированность части следующей компетенции: ПК-2 – способностью экспериментально определять термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов; ПК-3 – способностью определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями;

Раздел 2. Колебательная ИК спектроскопия.

Задания для тестового контроля: 2-7,13-14.

Вывод: выполнение заданий по данной теме позволяет оценить сформированность части следующей компетенции: ПК-2 – способностью экспериментально определять термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов; ПК-3 – способностью определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями;

Раздел 3. Масс-спектрометрия.

Задания для тестового контроля: 8-12.

Вывод: выполнение заданий по данной теме позволяет оценить сформированность части следующей компетенции: ПК-2 – способностью экспериментально определять термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов; ПК-3 – способностью определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями;

Раздел 4. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса. Совместное использование масс-спектрометрии, УФ, ИК, ПМР и ЯМР ^{13}C спектроскопии. Мессбауэровская и рентгеновская спектроскопия.

Задания для тестового контроля: 13-24.

Вывод: выполнение заданий по данной теме позволяет оценить сформированность части следующей компетенции: ПК-2 – способностью экспериментально определять термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов; ПК-3 – способностью определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями;

Дисциплина 4 «Высокомолекулярные соединения»

Раздел 1. Химия полимеров и полимерных композиционных материалов.

Вопросы для устного опроса:

1. Основные понятия и определения: полимер, олигомер, макромолекула, мономерное звено, степень полимеризации, контурная длина цепи.
2. Молекулярные массы и молекулярно-массовые распределения (ММР). Усредненные (средние) молекулярные массы (среднечисловая, средневесовая). Нормальное (наиболее вероятное) распределение.
3. Важнейшие свойства полимерных веществ, обусловленные большими размерами, цепным строением и гибкостью макромолекул.
4. Классификация полимеров в зависимости от происхождения, химического состава и строения основной цепи, в зависимости от топологии макромолекул. Однотяжные и двухтяжные макромолекулы.
5. Гомополимеры, сополимеры, блок- сополимеры, привитые сополимеры. Гомоцепные и гетероцепные полимеры. Биополимеры, основные биологические функции белков, рибонуклеиновой и дезоксирибонуклеиновой кислот.

Вывод: выполнение заданий по данной теме позволяет оценить сформированность части следующей компетенции: ПК-4 – способностью определять термодинамические характеристики процессов на поверхности, владением закономерностями адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях; ПК-5 – способностью определять механизмы сложных химических процессов, владеть законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий.

Раздел 2. Радикальная полимеризация и ее механизм.

Вопросы для устного опроса:

1. Радикальная полимеризация. Инициирование радикальной полимеризации. Типы инициаторов. Реакции роста, обрыва и передачи цепи.
2. Кинетика радикальной полимеризации при малых степенях превращения. Понятие о квазистационарном состоянии.
3. Молекулярная масса и молекулярно-массовое распределение полимеров, образующихся при радикальной полимеризации.
4. Полимеризация при глубоких степенях превращений. Реакционная способность мономеров и радикалов.

Вывод: выполнение заданий по данной теме позволяет оценить сформированность части следующей компетенции: ПК-4 – способностью определять термодинамические характеристики процессов на поверхности, владением закономерностями адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях; ПК-5 – способностью определять механизмы сложных химических процессов, владеть законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий.

Раздел 3. Сополимеризация, ее механизм и основные закономерности.

Вопросы для устного опроса:

1. Ионная, катионная и анионная, полимеризация. Реакционная способность мономеров в ионных реакциях. Катализаторы и сокатализаторы. Механизмы процесса.
2. Образование активного центра, рост и обрыв цепи. Скорости элементарных реакций.
3. Скорость процессов катионной и анионной полимеризации, влияние среды и температуры на кинетику и полидисперсность образующихся полимеров.
4. Примеры образования «живых» полимерных цепей.
5. Сополимеризация катионная и анионная

Задания для тестового контроля:

1. Какое из следующих условий является необходимым и достаточным для существования Тпр.верх.:
 - а. $\Delta H^0 < 0$;
 - б. $\Delta H^0 < 0, \Delta S^0 < 0$;
 - в. $\Delta H^0 > 0, \Delta S^0 > 0$;
 - г. $\Delta H^0 > 0$.
2. Какую природу имеет активный центр при полимеризации винилацетата в присутствии иницирующей системы Фентона « $Fe^{+2} + H_2O_2 \rightarrow$ »:
 - а. Катион;
 - б. Анион;
 - в. Свободный радикал;
 - г. Полимеризация не происходит.
3. Укажите чем обусловлено возрастание общей скорости радикальной полимеризации метилметакрилата в массе при конверсиях выше 15%?
 - а. Увеличением скорости роста цепи;
 - б. Уменьшением скорости обрыва цепи;
 - в. Увеличением скорости иницирования;
 - г. Одновременным действием всех указанных факторов.
4. В присутствии какого инициатора можно получить полиметилметакрилат полимеризацией метилметакрилата:
 - а. Пероксид бензоила;
 - б. BF_3 ;
 - в. Кислород воздуха при $100^\circ C$;
 - г. Любой из трех перечисленных выше.
5. Какие высшие полиолефины формулой $(-CH_2-CHR-)_n$ являются кристаллическими с учетом их конфигураций основной цепи:
 - а. Атактическая;
 - б. Гетеротактическая;
 - в. Изотактическая;
 - г. Синдиотактическая.

Вывод: выполнение заданий по данной теме позволяет оценить сформированность части следующей компетенции: ПК-4 – способностью определять термодинамические характеристики процессов на поверхности, владением закономерностями адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях; ПК-5 – способностью определять механизмы сложных химических процессов, владеть законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий.

Раздел 4. Методы получения полимерных композиционных материалов. Физика полимеров и полимерных композиционных материалов.

Вопросы для устного опроса:

1. Нанокompозиты. Типы ингредиентов, материалы и методы, применяемые для получения нанокompозитов.
2. Особенности их получения и основные свойства нанокompозитов.
3. Основные виды деструкции: химическая, термическая, термоокислительная, фото- и механическая.
4. Старение полимеров. Стабилизация высокомолекулярных соединений.
5. Кинетика механодеструкции полимеров. Предел механодеструкции и причины его существования. Понятие о стойкости полимеров и композиционных материалов к внешним факторам. Конфигурация и конформация макромолекул.
6. Основные модели полимерных цепей: свободносочлененная цепь, цепь с фиксированными углами.
7. Характеристики размеров и формы полимерных цепей. Внутреннее вращение и поворотная изомерия. Полимеры с хиральными центрами.
8. Конформация макромолекул и конформационная энергия
9. Стереорегулярность и микроструктура цепных молекул.

Вывод: выполнение заданий по данной теме позволяет оценить сформированность части следующей компетенции: ПК-4 – способностью определять термодинамические характеристики процессов на поверхности, владением закономерностями адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях; ПК-5 – способностью определять механизмы сложных химических процессов, владеть законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий.

Раздел 5. Физические и фазовые состояния полимеров. Физико-механические свойства полимеров.

Вопросы для устного опроса:

1. Стеклообразное, высокоэластическое и вязкотекучее. Аморфные и кристаллические полимеры.
2. Фазовые переходы, механизм кристаллизации и плавления кристаллов.
3. Влияние структуры и внешних воздействий на фазовые переходы.
4. Структура и свойства кристаллических полимеров. Условия образования кристаллического состояния в полимерах.
5. Основные типы кристаллических структур макромолекул. Упаковка цепных молекул в кристаллах. Морфология кристаллических полимеров.
6. Деформационные свойства. Напряжение, деформация и упругость.
7. Обобщенная форма закона Гука, измерение модулей упругости. Идеальное пластическое тело, процесс развития пластических деформаций.
8. Влияние гидростатического давления, температуры и скорости деформации на предел текучести.

9. Электрические свойства полимеров-диэлектриков и полимеров-проводников. Диэлектрическая поляризация и дипольные моменты полимеров.
10. Диэлектрическая проницаемость и диэлектрические потери, электрическая прочность полимеров и ПКМ. Электризация полимеров и электрический пробой.

Задания для тестового контроля:

1. Укажите какой из мономеров полимеризуется по механизму «живых цепей» в присутствии бутиллития:
 - а. Изобутилен;
 - б. Винилбутиловый эфир;
 - в. Стирол;
 - г. Пропилен.
2. В системе «винилбутиловый эфир - трехфтористый бор – растворитель» скорость полимеризации максимальна, если в качестве растворителя взят:
 - а. Гептан;
 - б. Бензол;
 - в. Нитробензол;
 - г. Ксилол.
3. Какие компоненты входят в состав каталитических систем Циглера-Натта:
 - а. $AlCl_3 + Al(C_2H_5)_3$;
 - б. $BF_3 + H_2O$;
 - в. $TiCl_4 / MgCl_2 + Al(C_2H_5)_3$;
 - г. $VCl_4 + C_4H_9Li$.
4. Расположите следующие мономеры (2) по возрастанию склонности к образованию «чередующихся» сополимеров при радикальной сополимеризации с бутадиеном -1,3 (1): н-бутилвиниловый эфир (БВЭ), метилметакрилат (ММА), метилакрилат (МА), стирол (Ст), акрилонитрил (АН);
 - а. БВЭ, АН < Ст < МА < ММА;
 - б. ММА < БВЭ < МА < Ст;
 - в. Ст < ММА < БВЭ, АН < МА;
 - г. МА < Ст < ММА < БВЭ, АН.
5. Какие преимущества ионно-координационной полимеризации используются при синтезе полиолефинов и каучуков:
 - а. Низкая себестоимость образующихся полимеров;
 - б. Умеренные температура и давление;
 - в. Низкая энергоёмкость производства;
 - г. Синтез атактических полимеров.

Вывод: выполнение заданий по данной теме позволяет оценить сформированность части следующей компетенции: ПК-4 – способностью определять термодинамические характеристики процессов на поверхности, владением закономерностями адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях; ПК-5 – способностью определять механизмы сложных химических процессов, владеть законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий.

Задание для контрольной работы по дисциплине (модулю)

Вариант 1

1. Классификация полимеров в зависимости от происхождения, химического состава и строения основной цепи, в зависимости от топологии макромолекул. Однотяжные и двухтяжные

- макромолекулы. Природные и синтетические полимеры. Органические, элементоорганические и неорганические полимеры. Линейные, разветвленные, лестничные и шитые полимеры, дендримеры. Гомополимеры, сополимеры, блок- сополимеры, привитые сополимеры. Гомоцепные и гетероцепные полимеры.
2. Макромолекулы в растворах. Термодинамический критерий растворимости и доказательство термодинамической равновесности растворов. Фазовые диаграммы систем полимер - растворитель. Критические температуры растворения. Неограниченное и ограниченное набухание.
 3. Термодинамическое поведение макромолекул в растворах и их особенности по сравнению с поведением молекул низкомолекулярных веществ. Отклонения от идеальности и их причины. Уравнение состояния полимера в растворе.
 4. Определение среднечисловой молекулярной массы из данных по осмотическому давлению растворов полимеров. Зависимость растворимости от молекулярной массы. Физико-химические основы фракционирования полимеров.
 5. Гидродинамические свойства макромолекул в растворах. Вязкость разбавленных растворов. Приведенная и характеристическая вязкости. Связь характеристической вязкости с молекулярной массой и средними размерами макромолекул. Вискозиметрия как метод определения средневязкостной молекулярной массы.
 6. Седиментация макромолекул (ультрацентрифугирование). Определение молекулярных масс методами ультрацентрифугирования и диффузии.
 7. Концентрированные растворы полимеров и гели. Ассоциация макромолекул в концентрированных растворах и структурообразование. Жидкокристаллическое состояние жесткоцепных полимеров. Лиотропные жидкокристаллические системы и их фазовые диаграммы. Особенности реологических и механических свойств концентрированных растворов.
 8. Пластификация полимеров. Правила объемных и молярных долей. Механические модели аморфных полимеров.
 9. Химические реакции, не приводящие к изменению степени полимеризации макромолекул: полимераналогичные превращения и внутримолекулярные превращения. Особенности реакционной способности функциональных групп макромолекул.
 10. Химические реакции, приводящие к изменению степени полимеризации макромолекул. Деструкция полимеров. Механизм цепной и случайной деструкции. Деполимеризация. Термоокислительная и фотохимическая деструкция. Механодеструкция. Принципы стабилизации полимеров.
 11. Сшивание полимеров (вулканизация каучуков, отверждение эпоксидных смол).
 12. Использование химических реакций макромолекул для химического и структурно- химического модифицирования полимерных материалов и изделий. Привитие и блок- сополимеры - основные принципы синтеза и физико-химические свойства.
 13. Полимеризация. Термодинамика полимеризации. Понятие о полимеризационно-деполимеризационном равновесии. Классификация цепных полимеризационных процессов.
 14. Радикальная полимеризация. Инициирование радикальной полимеризации. Типы инициаторов. Реакции роста, обрыва и передачи цепи. Кинетика радикальной полимеризации при малых степенях превращения. Понятие о квазистационарном состоянии. Молекулярная масса и молекулярно-массовое распределение полимеров, образующихся при радикальной полимеризации.
 15. Радикальная сополимеризация. Уравнение состава сополимеров. Относительные реакционные способности мономеров и радикалов. Роль стерических, полярных и других факторов; схема Q-e.

16. Катионная полимеризация. Характеристика мономеров, способных вступать в катионную полимеризацию. Катализаторы и сокатализаторы. Рост и ограничение роста цепей при катионной полимеризации. Влияние природы растворителя. Кинетика процесса.
17. Анионная полимеризация. Характеристика мономеров, способных вступать в анионную полимеризацию. Катализаторы анионной полимеризации. Инициирование, рост и ограничение роста цепей при анионной полимеризации. "Живые цепи".
18. Координационно-ионная полимеризация в присутствии гомогенных и гетерогенных катализаторов типа Циглера - Натта. Принципы синтеза стереорегулярных полимеров. Особенности ионной полимеризации циклических мономеров.
19. Поликонденсация. Типы реакций поликонденсации. Основные различия полимеризационных и поликонденсационных процессов. Термодинамика поликонденсации и поликонденсационное равновесие. Молекулярная масса и молекулярно-массовое распределение при поликонденсации. Кинетика поликонденсации.

Вариант 2

1. Второй закон термодинамики. Энтропия и ее изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно - Клаузиуса. Различные шкалы температур. Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца. Уравнения Максвелла. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов. Уравнение Гиббса - Гельмгольца. Работа и теплота химического процесса. Химические потенциалы.
2. Химическое равновесие. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций. Приведенная энергия Гиббса и ее использование для расчетов химических равновесий. Равновесие в поле внешних сил. Полные потенциалы.
3. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики. Статистическая термодинамика реальных систем. Потенциалы межмолекулярного взаимодействия и конфигурационный интеграл для реального газа. Распределения Бозе - Эйнштейна и Ферми - Дирака. Вырожденный идеальный газ. Электроны в металлах. Уровень Ферми. Статистическая теория Эйнштейна идеального кристалла, теория Дебая. Точечные дефекты кристаллических решеток. Равновесные и неравновесные дефекты. Вычисление сумм по состояниям для кристаллов с различными точечными дефектами. Нестехиометрические соединения и их термодинамическое описание.
4. Растворы. Фазовые равновесия. Различные типы растворов. Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение. Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонент растворов. Симметричная и несимметричная системы отсчета.
5. Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия. Зонная плавка. Осмотические явления. Парциальные молярные величины, их определение для бинарных систем. Функция смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства.
6. Гетерогенные системы. Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса. Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды, серы, фосфора и углерода. Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона - Клаузиуса. Двухкомпонентные системы.

Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Равновесие жидкость - пар в двухкомпонентных системах. Законы Гиббса - Коновалова. Азеотропные смеси. Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста. Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.

7. Адсорбция и поверхностные явления. Адсорбция. Адсорбент, адсорбат. Виды адсорбции. Структура поверхности и пористость адсорбента. Локализованная и делокализованная адсорбция. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Динамический характер адсорбционного равновесия. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Лэнгмюра. Адсорбция из растворов. Уравнение Брунауэра-Эмета - Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента.
8. *Химическая кинетика*. Основные понятия химической кинетики. Простые и сложные реакции, молекулярность и скорость простой реакции. Основной постулат химической кинетики. Способы определения скорости реакции. Кинетические кривые. Кинетические уравнения. Константа скорости и порядок реакции. Реакции переменного порядка.

Вариант 3

1. Взаимодействие электромагнитного излучения с веществом. Классификация спектроскопических методов.
2. Характеристики оптических спектральных приборов. Схема оптического спектрометра.
3. Источники возбуждения в абсорбционной спектроскопии.
4. Методы молекулярной спектроскопии. Классификация методов молекулярной спектроскопии.
5. Аналитическая абсорбционная молекулярная спектроскопия в УФ и видимой области спектра. Законы поглощения электромагнитного излучения. Основной закон поглощения, законы аддитивности оптических плотностей. Причины отклонения от основного закона поглощения.
6. *Люминесцентный метод*. Теория молекулярной люминесценции. Возбуждение и дезактивация молекул. Флуоресценция и фосфоресценция. Квантовый выход флуоресценции и фосфоресценции.
7. Интенсивность люминесценции, зависимость от концентрации люминофора. Тушение люминесценции. Люминесценция и молекулярная структура.
8. Инфракрасная спектроскопия (ИК), ее теоретические и методические основы. Скелетные и характеристические колебания в анализе органических соединений.
9. Неаналитические приложения ИК спектроскопии в физической химии.
10. Фурье-спектрометрия, области применения. Особенности ИК спектроскопии в ближней области.
11. Спектроскопия комбинационного рассеяния. Теоретические и методические основы метода. Рассеяние излучения. Стоксовы и антистоксовы линии. Способы возбуждения спектров. Использование в анализе.
12. Лазерная спектроскопия: применение лазеров в аналитической химии. Лазеры как источники возбуждения, их преимущество перед традиционными источниками.

Вариант 4

1. Взаимосвязь электронных спектров и структуры органических молекул: хромофоры и ауксохромы, батохромный и гипсохромный сдвиги, гипохромный и гиперхромный эффекты, классификация полос поглощения в электронных спектрах.
2. Избирательное поглощение важнейших ауксохромных и хромофорных групп: насыщенные гетероатомные ауксохромы, карбонильный хромофор, диеновый хромофор, еноновый хромофор, бензольный хромофор, правила Вудворда-Физера.

3. Принцип работы УФ спектрофотометра. Условия измерения УФ спектров. Примеры структурного анализа ненасыщенных органических соединений по спектру поглощения в ближней области УФ спектра.
4. Взаимосвязь инфракрасных спектров и структуры органических молекул: валентные и деформационные колебания, характеристичность колебаний и ее физические причины, факторы, вызывающие сдвиг полос поглощения и изменение их интенсивности.
5. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических соединений: C–C, C=C, C≡C, C_{аром}–C_{аром}, C_{sp3}–H, C_{sp2}–H, C_{sp}–H, C–O, C–N, O–H, N–H, S–H, C=O, CHO, COOH, COOR, CONaI, NO₂, C≡N.
6. Структурные области ИК спектра. Принципы отнесения полос поглощения. Последовательность проведения структурного анализа. Количественная ИК спектроскопия.
7. Принцип работы ИК спектрофотометра. Условия измерения ИК спектров. Примеры структурного анализа органических соединений по ИК спектру (область 4000 – 650 см⁻¹).
8. Физические основы метода масс-спектрометрии: принцип работы масс-спектрометра, его разрешающая сила, образование масс-спектра, основное уравнение масс-спектрометрии, типы регистрируемых ионов (молекулярные, осколочные, метастабильные, многозарядные).
9. Определение молекулярной брутто-формулы по масс-спектру: метод точного измерения масс молекулярных ионов, метод измерения интенсивностей пиков ионов, изотопных молекулярному иону.
10. Качественные теории масс-спектрометрии органических соединений: теория локализации заряда, теория устойчивости продуктов фрагментации. Масс-спектрометрические правила: азотное, “четно-электронное”, затрудненный разрыв связей, прилежащих к ненасыщенным системам. Основные типы реакций распада органических соединений под электронным ударом.
11. Установление строения органических соединений: метод функциональных групп, метод характеристических значений m/z. Основные направления фрагментации органических соединений под электронным ударом.
12. Понятие о методе химической ионизации и хроматомасс-спектрометрии. Примеры структурного анализа органических соединений по масс-спектру низкого разрешения.
13. Физические основы метода ЯМР: магнитные свойства ядер, основное уравнение ядерного магнитного резонанса, взаимодействия магнитных моментов ядер (тонкая и сверхтонкая структура сигналов ядер). Выбор резонансного ядра при изучении строения органических соединений.
14. Принцип работы ЯМР спектрометра. Анализ спектров ядерного магнитного резонанса ядер со спиновым квантовым числом I=1/2: химическая и магнитная эквивалентность ядер, номенклатура ядерных систем, A₂, AX, AB и A₂B системы, основные правила анализа спектров.
15. Спектроскопия протонного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов протонов, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов; константы спин-спинового взаимодействия J_{н-н}. Двойной резонанс.
16. Спектроскопия углеродного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов ядер ¹³C, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов, константы спин-спинового взаимодействия J_{C-н}, полное и частичное подавление спин-спинового взаимодействия ядер ¹³C и протонов. Ядерный эффект Оверхаузера.

Этап: проведение промежуточной аттестации по дисциплине

Вопросы для подготовки к кандидатскому экзамену по модулю дисциплин, направленных на подготовку к сдаче кандидатского экзамена

Вопросы к экзамену по дисциплине 1

1. Химическая термодинамика. Основные понятия и законы термодинамики. Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, интенсивные и экстенсивные переменные. Уравнения состояния. Теорема о соответственных состояниях. Вириальные уравнения состояния.
2. Первый закон термодинамики. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия, теплоемкость. Закон Гесса. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгофа. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах.
3. Второй закон термодинамики. Энтропия и ее изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно - Клаузиуса. Различные шкалы температур. Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца. Уравнения Максвелла. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов. Уравнение Гиббса - Гельмгольца. Работа и теплота химического процесса. Химические потенциалы.
4. Химическое равновесие. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций. Приведенная энергия Гиббса и ее использование для расчетов химических равновесий. Равновесие в поле внешних сил. Полные потенциалы.
5. Элементы статистической термодинамики. Микро- и микросостояния химических систем. Эргодическая гипотеза. Термодинамическая вероятность и ее связь с энтропией. Распределение Максвелла - Больцмана. Статистические средние значения макроскопических величин. Ансамбли Гиббса. Статистические выражения для основных термодинамических функций. Молекулярная сумма по состояниям и сумма по состояниям макроскопической системы. Поступательная, вращательная, электронная и колебательная суммы по состояниям. Статистический расчет энтропии. Постулат Планка и абсолютная энтропия. Составляющие внутренней энергии, теплоемкости и энтропии, обусловленные поступательным, вращательным и колебательным движением.
6. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики. Статистическая термодинамика реальных систем. Потенциалы межмолекулярного взаимодействия и конфигурационный интеграл для реального газа. Распределения Бозе - Эйнштейна и Ферми - Дирака. Вырожденный идеальный газ. Электроны в металлах. Уровень Ферми. Статистическая теория Эйнштейна идеального кристалла, теория Дебая. Точечные дефекты кристаллических решеток. Равновесные и неравновесные дефекты. Вычисление сумм по состояниям для кристаллов с различными точечными дефектами. Нестехиометрические соединения и их термодинамическое описание.
7. Элементы термодинамики необратимых процессов. Основные положения термодинамики неравновесных процессов. Локальное равновесие. Флуктуации. Функция диссипации. Потоки и силы. Скорость производства энтропии. Зависимость скорости производства энтропии от обобщенных потоков и сил. Соотношения взаимности Онзагера. Стационарное состояние системы и теорема Пригожина. Термодиффузия и ее описание в неравновесной термодинамике.
8. Растворы. Фазовые равновесия. Различные типы растворов. Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение. Стандартные состояния при

- определении химических потенциалов компонент растворов. Симметричная и несимметричная системы отсчета.
9. Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия. Зонная плавка. Осмотические явления. Парциальные мольные величины, их определение для бинарных систем. Функция смещения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства.
 10. Гетерогенные системы. Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса. Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды, серы, фосфора и углерода. Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона - Клаузиуса. Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Равновесие жидкость - пар в двухкомпонентных системах. Законы Гиббса - Коновалова. Азеотропные смеси. Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста. Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.
 11. Адсорбция и поверхностные явления. Адсорбция. Адсорбент, адсорбат. Виды адсорбции. Структура поверхности и пористость адсорбента. Локализованная и делокализованная адсорбция. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Динамический характер адсорбционного равновесия. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Лэнгмюра. Адсорбция из растворов. Уравнение Брунауэра-Эмета - Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента.
 12. Хроматография, различные ее типы (газовая, жидкостная, противоточная и др.).
 13. Поверхность раздела фаз. Свободная поверхностная энергия, поверхностное натяжение, избыточные термодинамические функции поверхностного слоя. Изменение поверхностного натяжения на границе жидкость — пар в зависимости от температуры. Связь свободной поверхностной энергии с теплотой сублимации (правило Стефана), модулем упругости и другими свойствами вещества. Эффект Ребиндера: изменение прочности и пластичности твердых тел вследствие снижения их поверхностной энергии.
 14. Капиллярные явления. Зависимость давления пара от кривизны поверхности жидкости. Капиллярная конденсация. Зависимость растворимости от кривизны поверхности растворяющихся частиц (закон Гиббса - Оствальда - Фрейндлиха).
 15. *Электрохимические процессы*. Растворы электролитов. Ион-дипольное взаимодействие как основной процесс, определяющий устойчивость растворов электролитов. Коэффициенты активности в растворах электролитов. Средняя активность и средний коэффициент активности, их связь с активностью отдельных ионов. Основные положения теории Дебая - Хюккеля. Потенциал ионной атмосферы.
 16. Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз в электрохимической цепи. Термодинамика гальванического элемента. Электродвижущая сила, ее выражение через энергию Гиббса реакции в элементе. Уравнения Нернста и Гиббса - Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи. Понятие электродного потенциала. Определение коэффициентов активности на основе измерений ЭДС гальванического элемента.
 17. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты.
 18. *Химическая кинетика*. Основные понятия химической кинетики. Простые и сложные реакции, молекулярность и скорость простой реакции. Основной постулат химической кинетики. Способы определения скорости реакции. Кинетические кривые. Кинетические уравнения. Константа скорости и порядок реакции. Реакции переменного порядка.
 19. Феноменологическая кинетика сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и

- последовательных реакций. Квазистационарное приближение. Метод Боденштейна - Темкина. Кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса - Ментен. Цепные реакции. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций. Кинетические особенности разветвленных цепных реакций. Предельные явления в разветвленных цепных реакциях. Полуостров воспламенения, период индукции. Тепловой взрыв.
20. Реакции в потоке. Реакции идеального вытеснения и идеального смешения. Колебательные реакции. Макрокинетика. Роль диффузии в кинетике гетерогенных реакций. Кинетика гетерогенных каталитических реакций. Различные режимы протекания реакций (кинетическая и внешняя кинетическая области, области внешней и внутренней диффузии).
 21. Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы ее определения. Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации. Термический и нетермические пути активации молекул. Обмен энергией (поступательной, вращательной и колебательной) при столкновениях молекул. Время релаксации в молекулярных системах. Теория активных столкновений. Сечение химических реакций. Формула Траутца - Льюиса. Расчет предэкспоненциального множителя по молекулярным постоянным. Стерический фактор.
 22. Теория переходного состояния (активированного комплекса). Поверхность потенциальной энергии. Путь и координата реакции. Статистический расчет константы скорости. Энергия и энтропия активации. Использование молекулярных постоянных при расчете константы скорости.
 23. Различные типы химических реакций. Мономолекулярные реакции в газах, схема Линдемана - Христиансена. Бимолекулярные и тримолекулярные реакции, зависимость предэкспоненциального множителя от температуры. Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц. Клеточный эффект и сольватация. Фотохимические и радиационно-химические реакции. Элементарные фотохимические процессы. Изменение физических и химических свойств молекул при электронном возбуждении. Квантовый выход. Закон Эйнштейна - Штарка.
 24. *Электрохимические реакции*. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Теория Гуи - Чапмена - Грэма. Электрокапиллярные явления, уравнение Липпмана.
 25. Скорость и стадии электродного процесса. Поляризация электродов. Полярография. Ток обмена и перенапряжение. Зависимость скорости стадии разряда от строения двойного слоя. Химические источники тока, их виды. Электрохимическая коррозия. Методы защиты от коррозии.
 26. *Катализ*. Классификация каталитических реакций и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия. *Гомогенный катализ*. Кислотно-основной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Бренстеда. Корреляционные уравнения для энергий активации и теплот реакций. Специфический и общий основной катализ. Нуклеофильный и электрофильный катализ. Катализ металлокомплексными соединениями. Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы. Ферментативный катализ. Адсорбционные и каталитические центры ферментов. Активность и субстратная селективность ферментов. Коферменты. Механизмы ферментативного катализа.
 27. *Гетерогенный катализ*. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Удельная и атомная активность. Селективность катализаторов. Роль адсорбции в кинетике гетерогенных каталитических реакций. Неоднородность поверхности катализаторов, нанесенные катализаторы. Энергия активации гетерогенных каталитических реакций.

Современные теории функционирования гетерогенных катализаторов. Основные промышленные каталитические процессы.

Вопросы к экзамену по дисциплине 2

1. Понятие о спектре. Взаимодействие электромагнитного излучения с веществом. Классификация спектроскопических методов.
2. Характеристики оптических спектральных приборов. Схема оптического спектрометра.
3. Источники возбуждения в абсорбционной спектроскопии.
4. Монохроматизация излучения: бездисперсионный и дисперсионный способы. Приемники излучения. Фотографические и фотоэлектрические методы.
5. Методы молекулярной спектроскопии. Классификация методов молекулярной спектроскопии.
6. Аналитическая абсорбционная молекулярная спектроскопия в УФ и видимой области спектра. Законы поглощения электромагнитного излучения. Основной закон поглощения, законы аддитивности оптических плотностей. Причины отклонения от основного закона поглощения.
7. Регистрация спектров поглощения. Анализ одно- и многокомпонентных систем. Селективное определение одного компонента в многокомпонентной смеси. Использование метода для определения числа компонентов и изучения химического равновесия.
8. *Люминесцентный метод*. Теория молекулярной люминесценции. Возбуждение и дезактивация молекул. Флуоресценция и фосфоресценция. Квантовый выход флуоресценции и фосфоресценции.
9. Интенсивность люминесценции, зависимость от концентрации люминофора. Тушение люминесценции. Люминесценция и молекулярная структура.
10. Инфракрасная спектроскопия (ИК), ее теоретические и методические основы. Скелетные и характеристические колебания в анализе органических соединений.
11. Неаналитические приложения ИК спектроскопии в физической химии.
12. Фурье-спектрометрия, области применения. Особенности ИК спектроскопии в ближней области.
13. Спектроскопия комбинационного рассеяния. Теоретические и методические основы метода. Рассеяние излучения. Стоксовы и антистоксовы линии. Способы возбуждения спектров. Использование в анализе.
14. Лазерная спектроскопия: применение лазеров в аналитической химии. Лазеры как источники возбуждения, их преимущество перед традиционными источниками.

Вопросы к экзамену по дисциплине 3

15. Физические основы методов оптической спектроскопии: электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора.
16. Взаимосвязь электронных спектров и структуры органических молекул: хромофоры и ауксохромы, батохромный и гипсохромный сдвиги, гипсохромный и гиперхромный эффекты, классификация полос поглощения в электронных спектрах.
17. Избирательное поглощение важнейших ауксохромных и хромофорных групп: насыщенные гетероатомные ауксохромы, карбонильный хромофор, диеновый хромофор, еноновый хромофор, бензольный хромофор, правила Вудворда-Физера.
18. Принцип работы УФ спектрофотометра. Условия измерения УФ спектров. Примеры структурного анализа ненасыщенных органических соединений по спектру поглощения в ближней области УФ спектра.

19. Частота и интенсивность поглощения в колебательных спектрах двухатомных молекул, основные колебания многоатомных молекул. Взаимосвязь инфракрасных спектров и структуры органических молекул: валентные и деформационные колебания, характеристичность колебаний и ее физические причины, факторы, вызывающие сдвиг полос поглощения и изменение их интенсивности.
20. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических соединений: C–C, C=C, C≡C, C_{аром}–C_{аром}, C_{sp³}–H, C_{sp²}–H, C_{sp}–H, C–O, C–N, O–H, N–H, S–H, C=O, CHO, COOH, COOR, COHal, NO₂, C≡N.
21. Структурные области ИК спектра. Принципы отнесения полос поглощения. Последовательность проведения структурного анализа. Количественная ИК спектроскопия.
22. Принцип работы ИК спектрофотометра. Условия измерения ИК спектров. Примеры структурного анализа органических соединений по ИК спектру (область 4000 – 650 см⁻¹).
23. Физические основы метода масс-спектрометрии: принцип работы масс-спектрометра, его разрешающая сила, образование масс-спектра, основное уравнение масс-спектрометрии, типы регистрируемых ионов (молекулярные, осколочные, метастабильные, многозарядные).
24. Определение молекулярной брутто-формулы по масс-спектру: метод точного измерения масс молекулярных ионов, метод измерения интенсивностей пиков ионов, изотопных молекулярному иону.
25. Качественные теории масс-спектрометрии органических соединений: теория локализации заряда, теория устойчивости продуктов фрагментации. Масс-спектрометрические правила: азотное, “четно-электронное”, затрудненный разрыв связей, прилежащих к ненасыщенным системам. Основные типы реакций распада органических соединений под электронным ударом.
26. Термические реакции в масс-спектрометре. Метастабильные ионы. Методы двойной и кратной масс-спектрометрии (МС/МС, МСⁿ).
27. Установление строения органических соединений: метод функциональных групп, метод характеристических значений m/z. Основные направления фрагментации органических соединений под электронным ударом.
28. Понятие о методе химической ионизации и хроматомасс-спектрометрии. Примеры структурного анализа органических соединений по масс-спектру низкого разрешения.
29. Физические основы метода ЯМР: магнитные свойства ядер, основное уравнение ядерного магнитного резонанса, взаимодействия магнитных моментов ядер (тонкая и сверхтонкая структура сигналов ядер). Выбор резонансного ядра при изучении строения органических соединений.
30. Принцип работы ЯМР спектрометра. Анализ спектров ядерного магнитного резонанса ядер со спиновым квантовым числом I=1/2: химическая и магнитная эквивалентность ядер, номенклатура ядерных систем, A₂, AX, AB и A₂B системы, основные правила анализа спектров.
31. Спектроскопия протонного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов протонов, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов; константы спин-спинового взаимодействия J_{H-H}. Двойной резонанс.
32. Спектроскопия углеродного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов ядер ¹³C, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов, константы спин-спинового взаимодействия J_{C-H}, полное и частичное подавление спин-спинового взаимодействия ядер ¹³C и протонов. Ядерный эффект Оверхаузера.
33. Понятие о спектроскопии ядерного магнитного резонанса динамических систем (обменные процессы). Двумерная спектроскопия ЯМР. Примеры структурного анализа органических соединений по спектрам ПМР и ЯМР ¹³C.
34. Особенности структурного анализа органических соединений при совместном использовании спектральных методов. Алгоритм структурного анализа. Примеры решения задач структурного анализа.

Вопросы к экзамену по дисциплине 4

1. Основные понятия и определения: полимер, олигомер, макромолекула, мономерное звено, степень полимеризации, контурная длина цепи. Молекулярные массы и молекулярно-массовые распределения (ММР). Усредненные (средние) молекулярные массы (среднечисловая, средневесовая). Нормальное (наиболее вероятное) распределение. Важнейшие свойства полимерных веществ, обусловленные большими размерами, цепным строением и гибкостью макромолекул. Роль полимеров в живой природе и их значение как промышленных материалов (пластмассы, каучуки, волокна и пленки, покрытия, клеи).
2. Классификация полимеров в зависимости от происхождения, химического состава и строения основной цепи, в зависимости от топологии макромолекул. Однотяжные и двухтяжные макромолекулы. Природные и синтетические полимеры. Органические, элементоорганические и неорганические полимеры. Линейные, разветвленные, лестничные и сшитые полимеры, дендримеры. Гомополимеры, сополимеры, блок-сополимеры, привитые сополимеры. Гомоцепные и гетероцепные полимеры.
3. Конфигурация макромолекулы и конфигурационная изомерия. Локальные и конфигурационные изомеры в макромолекулах полимеров монозамещенных этиленов и диенов. Стереоиомерия и стереорегулярные макромолекулы. Изотактические и синдиотактические полимеры.
4. Конформационная изомерия и конформация макромолекулы. Внутримолекулярное вращение и гибкость макромолекулы. Количественные характеристики гибкости макромолекул (среднеквадратичное расстояние между концами цепи, радиус инерции макромолекулы, статистический сегмент, персистентная длина). Свободно-сочлененная цепь как идеализированная модель гибкой макромолекулы. Функция распределения расстояний между концами свободносочлененной цепи (гауссовы клубки). Средние размеры макромолекулы с учетом постоянства валентных углов. Энергетические барьеры внутреннего вращения; понятие о природе тормозящего потенциала. Поворотные изомеры и гибкость реальных цепей. Связь гибкости (жесткости) макромолекул с их химическим строением: факторы, влияющие на гибкость реальных цепей.
5. Макромолекулы в растворах. Термодинамический критерий растворимости и доказательство термодинамической равновесности растворов. Фазовые диаграммы систем полимер - растворитель. Критические температуры растворения. Неограниченное и ограниченное набухание.
6. Термодинамическое поведение макромолекул в растворах и их особенности по сравнению с поведением молекул низкомолекулярных веществ. Отклонения от идеальности и их причины. Уравнение состояния полимера в растворе.
7. Определение среднечисловой молекулярной массы из данных по осмотическому давлению растворов полимеров. Зависимость растворимости от молекулярной массы. Физико-химические основы фракционирования полимеров.
8. Светорассеяние как метод определения средневесовой молекулярной массы полимеров. Определение размеров макромолекул.
9. Гидродинамические свойства макромолекул в растворах. Вязкость разбавленных растворов. Приведенная и характеристическая вязкости. Связь характеристической вязкости с молекулярной массой и средними размерами макромолекул. Вискозиметрия как метод определения средневязкостной молекулярной массы.
10. Диффузия макромолекул в растворах. Гельпроникающая хроматография и фракционирование полимеров.
11. Седиментация макромолекул (ультрацентрифугирование). Определение молекулярных масс методами ультрацентрифугирования и диффузии.
12. Ионизирующиеся макромолекулы (полиэлектролиты). Химические и физико-химические особенности поведения ионизирующихся макромолекул (поликислот, полиоснований и их

- солей). Количественные характеристики силы поликислот и полиоснований. Электростатическая энергия ионизированных макромолекул. Специфическое связывание противоионов. Кооперативные конформационные превращения ионизирующихся полипептидов в растворах. Изоэлектрическая и изоионная точка. Амфотерные полиэлектролиты.
13. Концентрированные растворы полимеров и гели. Ассоциация макромолекул в концентрированных растворах и структурообразование. Жидкокристаллическое состояние жесткоцепных полимеров. Лиотропные жидкокристаллические системы и их фазовые диаграммы. Особенности реологических и механических свойств концентрированных растворов.
 14. Структура и основные физические свойства полимерных тел. Особенности молекулярного строения полимеров и принципы упаковки макромолекул. Аморфные и кристаллические полимеры. Условия, необходимые для кристаллизации полимеров. Температура кристаллизации и температура плавления. Структура и надмолекулярная организация кристаллических полимеров. Различия и сходство в структурной организации кристаллических и аморфных полимеров. Термотропные жидкокристаллические (мезоморфные) полимеры.
 15. Свойства аморфных полимеров. Три физических состояния. Термомеханические кривые аморфных полимеров.
 16. Высокоэластическое состояние. Термодинамика и молекулярный механизм высокоэластической деформации. Энтропийная природа высокоэластичности. Связь между равновесной упругой силой и удлинением. Нижний предел молекулярных масс, необходимых для проявления высокоэластичности. Релаксационные явления в полимерах. Механические и диэлектрические потери.
 17. Стеклообразное состояние. Особенности полимерных стекол. Вынужденная эластичность и изотермы растяжения. Механизм вынужденно-эластической деформации. Предел вынужденной эластичности. Хрупкость полимеров.
 18. Вязко-текучее состояние. Механизм вязкого течения. Кривые течения полимеров. Зависимость температуры вязкого течения от молекулярной массы. Аномалии вязкого течения. Формование изделий из полимеров на режиме вязкого течения.
 19. Пластификация полимеров. Правила объемных и молярных долей. Механические модели аморфных полимеров.
 20. Свойства кристаллических полимеров. Термомеханические кривые кристаллических и кристаллизующихся аморфных полимеров. Изотермы растяжения и молекулярный механизм "холодного течения" кристаллических полимеров и полимерных стекол при растяжении.
 21. Долговечность полимерных материалов. Механизм разрушения полимеров.
 22. Ориентированные структуры кристаллических и аморфных полимеров. Анизотропия механических свойств. Способы ориентации. Принципы формования ориентированных волокон и пленок из расплавов и растворов. Особенности формирования жидкокристаллической фазы; получение суперпрочных волокон и пластиков. Композиционные материалы. Принципы формования полимеров, наполненные полимеры.
 23. Химические реакции, не приводящие к изменению степени полимеризации макромолекул: полимераналогичные превращения и внутримолекулярные превращения. Особенности реакционной способности функциональных групп макромолекул.
 24. Примеры использования полимераналогичных превращений и внутримолекулярных реакций для получения новых полимеров.
 25. Химические реакции, приводящие к изменению степени полимеризации макромолекул. Деструкция полимеров. Механизм цепной и случайной деструкции. Деполимеризация. Термоокислительная и фотохимическая деструкция. Механодеструкция. Принципы стабилизации полимеров.
 26. Сшивание полимеров (вулканизация каучуков, отверждение эпоксидных смол).

27. Использование химических реакций макромолекул для химического и структурно- химического модифицирования полимерных материалов и изделий. Привитие и блок- сополимеры - основные принципы синтеза и физико-химические свойства.
28. Полимеризация. Термодинамика полимеризации. Понятие о полимеризационно-деполимеризационном равновесии. Классификация цепных полимеризационных процессов.
29. Радикальная полимеризация. Инициирование радикальной полимеризации. Типы инициаторов. Реакции роста, обрыва и передачи цепи. Кинетика радикальной полимеризации при малых степенях превращения. Понятие о квазистационарном состоянии. Молекулярная масса и молекулярно-массовое распределение полимеров, образующихся при радикальной полимеризации.
30. Радикальная сополимеризация. Уравнение состава сополимеров. Относительные реакционные способности мономеров и радикалов. Роль стерических, полярных и других факторов; схема Q-e.
31. Способы проведения полимеризации: в массе, в растворе, в суспензии и в эмульсии.
32. Катионная полимеризация. Характеристика мономеров, способных вступать в катионную полимеризацию. Катализаторы и сокатализаторы. Рост и ограничение роста цепей при катионной полимеризации. Влияние природы растворителя. Кинетика процесса.
33. Анионная полимеризация. Характеристика мономеров, способных вступать в анионную полимеризацию. Катализаторы анионной полимеризации. Инициирование, рост и ограничение роста цепей при анионной полимеризации. "Живые цепи".
34. Координационно-ионная полимеризация в присутствии гомогенных и гетерогенных катализаторов типа Циглера - Натта. Принципы синтеза стереорегулярных полимеров. Особенности ионной полимеризации циклических мономеров.
35. Поликонденсация. Типы реакций поликонденсации. Основные различия полимеризационных и поликонденсационных процессов. Термодинамика поликонденсации и поликонденсационное равновесие. Молекулярная масса и молекулярно-массовое распределение при поликонденсации. Кинетика поликонденсации.

Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения, характеризующих этапы формирования компетенций

Методические рекомендации по проведению основных видов учебных занятий

При изучении дисциплины используются следующие основные методы и средства обучения, направленные на повышение качества подготовки аспирантов путем развития у аспирантов творческих способностей и самостоятельности:

- Контекстное обучение – мотивация аспирантов к усвоению знаний путем выявления связей между конкретными знаниями и его применением.
- Проблемное обучение – стимулирование аспирантов к самостоятельному приобретению знаний, необходимых для решения конкретной проблемы.
- Обучение на основе опыта – активизация познавательной деятельности аспиранта за счет ассоциации и собственного опыта с предметом изучения.
- Индивидуальное обучение – выстраивание аспирантами собственной образовательной траектории на основе формирования индивидуальной программы с учетом интересов аспирантов.

Междисциплинарное обучение – использование знаний из разных областей, их группировка и концентрация в контексте решаемой задачи.

Лекции являются одним из основных методов обучения по дисциплинам, направленным на подготовку к кандидатскому экзамену, которые должны решать следующие задачи:

- изложить основной материал программы курса;
- развить у аспирантов потребность к самостоятельной работе над учебником и научной литературой.

Главной задачей каждой лекции является раскрытие сущности темы и анализ ее основных положений.

Содержание лекций определяется рабочей программой курса. Крайне желательно, чтобы каждая лекция охватывала и исчерпывала определенную тему курса и представляла собой логически вполне законченную работу. Лучше сократить тему, но не допускать перерыва ее на таком месте, когда основная идея еще полностью не раскрыта.

Привлечение графического и табличного материала на лекции позволит более объемно изложить материал.

Целью *практических занятий* является:

- закрепление теоретического материала, рассмотренного аспирантами самостоятельно;
- проверка уровня понимания аспирантами вопросов, рассмотренных самостоятельно по учебной литературе, степени и качества усвоения материала аспирантами;
- восполнение пробелов в пройденной теоретической части курса и оказание помощи в его усвоении.

В начале очередного занятия необходимо сформулировать цель, поставить задачи. Аспиранты выполняют задания, а преподаватель контролирует ход их выполнения путем устного опроса, оценки рефератов, проверки тестов, проверки практических заданий.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы аспирантов

Целью самостоятельной работы аспирантов является формирование способностей к самостоятельному познанию и обучению, поиску литературы, обобщению, оформлению и представлению полученных результатов, их критическому анализу, поиску новых неординарных решений, аргументированному отстаиванию своих предложений, умений подготовки выступлений и ведения дискуссий.

Методические рекомендации призваны помочь аспирантам организовать самостоятельную работу при изучении курса: с материалами лекций, практических и семинарских занятий, литературы по общим и специальным вопросам экономических наук.

Задачами СРС являются:

- систематизация и закрепление полученных теоретических знаний и практических умений;
- углубление и расширение теоретических знаний;
- формирование умений использовать нормативную, правовую, справочную документацию и специальную литературу;
- развитие познавательных способностей и активности: творческой инициативы, самостоятельности, ответственности и организованности;
- формирование самостоятельности мышления, способностей к саморазвитию, самосовершенствованию и самореализации;
- развитие исследовательских умений;
- использование материала, собранного и полученного в ходе самостоятельных занятий на семинарах, на практических и лабораторных занятиях, при написании курсовых и выпускной квалификационной работ, для эффективной подготовки к итоговым зачетам и экзаменам.

Аудиторная самостоятельная работа по дисциплине выполняется на учебных занятиях под непосредственным руководством преподавателя и по его заданию.

Внеаудиторная самостоятельная работа выполняется аспирантом по заданию преподавателя, но без его непосредственного участия.

Основными видами самостоятельной работы аспиранта без участия преподавателя являются:

- формирование и усвоение содержания конспекта лекций на базе рекомендованной лектором учебной литературы, включая информационные образовательные ресурсы (электронные учебники, электронные библиотеки и др.);

- подготовка к семинарам, их оформление;

- составление аннотированного списка статей из соответствующих журналов по темам занятий;

- выполнение домашних заданий в виде решения отдельных задач, проведения типовых расчетов и индивидуальных работ по отдельным разделам содержания дисциплин и т.д.

Самостоятельная работа аспирантов осуществляется в следующих *формах*:

- подготовка к семинарским занятиям,

- изучение дополнительной литературы и подготовка ответов на вопросы для самостоятельного изучения,

- подготовка к тестированию,

- написание реферата.

1) *Подготовка к семинарским и практическим занятиям.*

При подготовке к семинарским занятиям аспирантам необходимо ориентироваться на вопросы, вынесенные на обсуждение. На семинарских занятиях проводятся опросы, тестирование, разбор конкретных ситуаций, с активным обсуждением вопросов, в том числе по группам, с целью эффективного усвоения материала в рамках предложенной темы, выработки умений и навыков в профессиональной деятельности, а также в области ведения переговоров, дискуссий, обмена информацией, грамотной постановки задач, формулирования проблем, обоснованных предложений по их решению и аргументированных выводов.

2) *Изучение основной и дополнительной литературы при подготовке к семинарским и практическим занятиям.*

В целях эффективного и полноценного проведения таких мероприятий аспиранты должны тщательно подготовиться к вопросам семинарского занятия. Особенно поощряется и положительно оценивается, если аспирант самостоятельно организует поиск необходимой информации с использованием периодических изданий, информационных ресурсов сети ИНТЕРНЕТ и баз данных специальных программных продуктов.

Самостоятельная работа аспирантов должна опираться на сформированные навыки и умения, приобретенные во время прохождения других курсов. Составляющим компонентом его работы должно стать творчество. В связи с этим рекомендуется:

1. Начинать подготовку к занятию со знакомства с опубликованными законодательно-правовыми документами.

2. Обратите внимание на структуру, композицию, язык документа, время и историю его появления.

3. Определите основные идеи, принципы, тезисы, заложенные в документ.

4. Выясните, какой сюжет, часть изучаемой проблемы позволяет осветить проанализированный источник.

5. Проведите работу с незнакомыми экономическими терминами и понятиями, для чего используйте словари экономических терминов, энциклопедические словари, словари иностранных слов и др.

Затем необходимо ознакомиться с библиографией темы и вопроса, выбрать доступные Вам издания из списка основной литературы, специальной литературы, рекомендованной к лекциям и семинарам. Рекомендованные списки могут быть дополнены.

Используйте справочную литературу. Поиск можно продолжить, изучив примечания и сноски в уже имеющихся у Вас в руках монографиях, статьях.

Работая с литературой по теме семинара, делайте выписки текста, содержащего характеристику или комментарий уже знакомого Вам источника. После чего вернитесь к тексту документа (желательно полному, без купюр) и проведите его анализ уже в контексте изученной исследовательской литературы.

Возникающие на каждом этапе работы мысли следует записывать. Анализ документа следует сделать составной частью проработки вопросов семинара и выступления аспиранта на занятии. Общее знание проблемы, обсуждаемой на семинарском занятии, должно сочетаться с глубоким знанием источников.

Следует составить сложный план, схему ответа на каждый вопрос плана семинарского занятия.

Проверить себя можно, выполнив тесты.

Рекомендации по оцениванию устного опроса по темам дисциплины.

Оценки «аттестован» заслуживает аспирант, при устном ответе которого:

- содержание раскрывает тему задания;
- материал изложен логически последовательно;
- убедительно доказана практическая значимость.

Оценка «не аттестован», выставляется аспиранту, обнаружившему пробелы в знаниях основного программного материала по теме опроса.

Рекомендации по оцениванию результатов решения задач

Процент от максимального количества баллов	Правильность (ошибочность) решения
100	Полное верное решение. В логическом рассуждении и решении нет ошибок, задача решена рациональным способом. Получен правильный ответ. Ясно описан способ решения.
81-100	Верное решение, но имеются небольшие недочеты, в целом не влияющие на решение, такие как небольшие логические пропуски, не связанные с основной идеей решения. Решение оформлено не вполне аккуратно, но это не мешает пониманию решения.
66-80	Решение в целом верное. В логическом рассуждении и решении нет существенных ошибок, но задача решена неоптимальным способом или допущено не более двух незначительных ошибок. В работе присутствуют арифметическая ошибка, механическая ошибка или описка при переписывании выкладок или ответа, не исказившие содержание ответа.
46-65	В логическом рассуждении и решении нет ошибок, но допущена существенная ошибка в расчетах. При объяснении сложного явления указаны не все существенные факторы.
31-45	Имеются существенные ошибки в логическом рассуждении и в решении. Рассчитанное значение искомой величины искажает содержание ответа. Доказаны вспомогательные утверждения, помогающие в решении задачи.

0-30	Рассмотрены отдельные случаи при отсутствии решения. Отсутствует окончательный численный ответ (если он предусмотрен в задаче). Правильный ответ угадан, а выстроенное под него решение - безосновательно.
0	Решение неверное или отсутствует

Критерии оценки результатов решения задач

Оценка (стандартная)	Оценка (тестовые нормы)
Отлично	80 – 100%
Хорошо	66 – 80%
Удовлетворительно	46 – 65%
Неудовлетворительно	Менее 46%

Рекомендации по оцениванию тестового задания.

На выполнение тестового задания аспиранту отводится 20 минут. Предлагается выбрать один правильный ответ из предложенных блоков вопросов.

Критерии оценки результатов тестирования

Оценка (стандартная)	Оценка (тестовые нормы)
Отлично	80 – 100%
Хорошо	70 – 79%
Удовлетворительно	60 – 69%
Неудовлетворительно	Менее 60%

Методические указания по подготовке к кандидатскому экзамену

Организация и проведение кандидатских экзаменов в СурГУ регламентируется следующими документами:

- Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. №842 «О порядке присуждения ученых степеней»,
- Приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 28.03.2014 г. №247 «Порядок прикрепления лиц для сдачи кандидатских экзаменов, сдачи кандидатских экзаменов и их перечень»;
- Письмом Министерства образования и науки Российской Федерации от 28 октября 2014 г. №13-4139 «О подтверждении результатов кандидатских экзаменов»,
- СТО-2.12.11 «Порядок проведения кандидатских экзаменов».

Кандидатские экзамены являются формой промежуточной аттестации аспирантов и лиц, прикрепленных для сдачи кандидатских экзаменов (экстернов) без освоения основных профессиональных образовательных программ высшего образования подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре, их сдача обязательна для присуждения ученой степени кандидата наук.

Цель кандидатского экзамена по специальности 02.00.04 Физическая химия состоит в проверке приобретенных аспирантами и соискателями ученой степени кандидата наук знаний, касающихся важнейших проблем физической химии. Экзамен также ставит целью установить глубину профессиональных знаний соискателя ученой степени кандидата химических наук, уровень подготовленности к самостоятельной научно-исследовательской работе.

К экзамену допускаются аспиранты и соискатели, не имеющие задолженности по дисциплинам учебного плана на момент сдачи экзамена.

Аспирант, не сдавший кандидатский экзамен по специальности, не считается завершившим обучение в аспирантуре.

Методические указания содержат материал, который позволит сориентировать аспирантов по теоретическим вопросам в рамках изучаемой темы, а также представляющий основу при выполнении практических заданий, дающих возможность сформировать компоненты компетенций, необходимых обучающимся для успешной профессиональной деятельности.

Физическая химия является основным теоретическим фундаментом современной химии, использующим теоретические методы таких важнейших разделов физики, как квантовая механика, статистическая физика и термодинамика, нелинейная динамика, теория поля и др. Она включает учение о строении вещества, в том числе: о строении молекул, химическую термодинамику, химическую кинетику и катализ. В качестве отдельных разделов в физической химии выделяют также электрохимию, фотохимию, физическую химию поверхностных явлений (в том числе адсорбцию), радиационную химию, учение о коррозии металлов, физическую химию высокомолекулярных соединений и др.

Критерии оценки кандидатского экзамена

Экзамен оценивается по четырехбалльной шкале с оценками: «отлично»; «хорошо»; «удовлетворительно»; «неудовлетворительно».

Экзаменуемый получает оценку «отлично», если он успешно справляется со всеми заданиями, предложенными в билете; демонстрирует отличное знание теоретического материала; хорошо ориентируется в положениях своего научного исследования.

В случае наличия небольших несоответствий при изложении теоретического материала экзаменуемый получает оценку «хорошо». Экзаменуемый должен хорошо ориентироваться в основных положениях своего научного исследования.

При недостаточной адекватности раскрытия теоретических вопросов ответ экзаменуемого оценивается отметкой «удовлетворительно». Экзаменуемый должен ориентироваться в основных положениях своего научного исследования.

Экзаменуемый получает оценку «неудовлетворительно», если он не справляется с заданиями билета, демонстрирует плохое владение теоретическим материалом или отказывается отвечать на экзаменационные вопросы, не может обсуждать основные положения своего научного исследования.

Получение положительных оценок (отлично, хорошо, удовлетворительно) позволяет сделать вывод о достаточной сформированности следующих компетенций: **ОПК-1** – способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий; **ПК-2** – способностью экспериментально определять термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов; **ПК-3** – способностью определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями; **ПК-4** – способностью определять термодинамические характеристики процессов на поверхности, владением закономерностями адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях; **ПК-5** – способностью определять механизмы сложных химических процессов, владеть законами физико-химической гидродинамики, растворения и

кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий; **УК-1** – способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.