

**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.



**ПРОГРАММА
ГОСУДАРСТВЕННОЙ ИТОГОВОЙ АТТЕСТАЦИИ
(уровень подготовки кадров высшей квалификации)**

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.

Программа государственной итоговой аттестации составлена в соответствии с требованиями:

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)»

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

ЦЕЛИ ГОСУДАРСТВЕННОЙ ИТОГОВОЙ АТТЕСТАЦИИ

Целью государственной итоговой аттестации (ГИА) является определение сформированности универсальных, общепрофессиональных и профессиональных компетенций выпускника аспирантуры, определяющих его подготовленность к решению профессиональных задач.

Задачи государственной итоговой аттестации:

- выявление уровня подготовленности выпускника к самостоятельной научно-исследовательской и преподавательской работе и ее оценка;
- развитие навыков самостоятельной научной и педагогической деятельности, систематизация теоретических и практических навыков, полученных в результате обучения.

1. МЕСТО ГОСУДАРСТВЕННОЙ ИТОГОВОЙ АТТЕСТАЦИИ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Государственная итоговая аттестация завершает освоение основных профессиональных образовательных программ подготовки кадров высшей квалификации.

Государственная итоговая аттестация обучающихся по программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре проводится в форме (в указанной последовательности):

- государственного экзамена;
- защиты научного доклада об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации), оформленной в соответствии с Положением о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842.

В соответствии с ФГОС ВО (подготовка кадров высшей квалификации) по направлению подготовки «04.06.01 Химические науки», направленность программы «Физическая химия» в блок «Государственная итоговая аттестация» входит подготовка и сдача государственного экзамена и представление научного доклада об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации).

2. КОМПЕТЕНТНОСТНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ВЫПУСКНИКА

Компетентностная характеристика выпускника аспирантуры по направлению подготовки «04.06.01 Химические науки», направленность программы «Физическая химия».

Государственная итоговая аттестация призвана определить степень сформированности следующих компетенций выпускников аспирантуры:

-способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);

-способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки (УК-2);

-готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач (УК-3);

-готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках (УК-4);

-способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития (УК-5);

-способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);

-готовностью организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук (ОПК-2);

-готовность к преподавательской деятельности по основным программам высшего образования (ОПК-3);

- способностью владеть методологией теоретических и экспериментальных исследований, адаптировать и обобщать их результаты по направленности ОПОП при преподавании дисциплин в вузе (ПК-1);

- способностью экспериментально определять термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов (ПК-2);

- способностью определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями (ПК-3);

- способностью определять термодинамические характеристики процессов на поверхности, владеть закономерностями адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях (ПК-4);

- способностью определять механизмы сложных химических процессов, владеть законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий (ПК-5).

В результате проведения государственной итоговой аттестации обучающийся должен:

Знать:

- цели, задачи, основные разделы, объекты и методы физической химии,
- важнейшие методы исследования физико-химических процессов, теоретические основы современных методов математической и статистической обработки химических данных,
- 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

Уметь:

- интерпретировать результаты эксперимента на основе современного научного знания, делать заключение на основе полученных экспериментальных данных,
- анализировать собранный эмпирический материал и делать достоверные выводы, планировать научно-исследовательскую работу в области физической химии,
- обосновать новизну и значимость собственного исследования,
- критически анализировать полученную информацию и представлять результаты собственных научных исследований,
- в рамках поставленной задачи самостоятельно планировать экспериментальную работу, самостоятельно ставить цель и выбирать пути ее достижения при анализе и обобщении информации,
- вести корректную дискуссию в процессе представления материалов, отстаивать собственную научную концепцию,
- самостоятельно получать экспериментальные данные по выбранной тематике исследования,
- использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования,

- оформлять и представлять результаты научных исследований,
- 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.

Владеть:

- основными методами химических и физико-химических анализов, навыком обоснованного выбора экспериментальных методов и средств решения сформулированных задач по направленности физическая химия,
- систематическими и углубленными знаниями по выбранной направленности подготовки; навыками профессионального мышления,
- логикой научного исследования; методами поиска научной информации, навыками публичных выступлений и ведения научной дискуссии,
- современными методами математической и статистической обработки экспериментальных данных,
- навыками обработки экспериментальных данных физических экспериментов с помощью современного программного обеспечения,
- навыками подготовки и представления доклада или развернутого выступления по тематике, связанной с направлением научного исследования,
- опытом применения современных методов в анализе веществ и материалов,
- методами перспективного планирования, подготовки и проведения НИР, обработки результатов экспериментальных исследований в области физической химии,
- основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, а также методами изложения информации в виде научных публикаций,
- 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.

3. ПРОГРАММА ГОСУДАРСТВЕННОГО ЭКЗАМЕНА

3.1 Форма проведения государственного экзамена

Государственный экзамен представляет собой проверку теоретических знаний аспиранта и практических умений осуществлять научно-педагогическую деятельность. При сдаче государственного экзамена аспирант должен показать способность самостоятельно осмысливать и решать актуальные педагогические задачи своей профессиональной деятельности, профессионально излагать специальную информацию, научно аргументировать и защищать свою точку зрения, опираясь на полученные углубленные знания, умения и сформированные компетенции.

Государственный экзамен представляет собой традиционный устный (письменный) междисциплинарный экзамен, проводимый по утвержденным билетам (списку вопросов).

4.2 Порядок проведения государственного экзамена

Государственный экзамен проводится в сроки, определенные в учебном плане, по дисциплинам, результаты освоения которых имеют определяющее значение для профессиональной деятельности выпускника.

Государственный экзамен проводится в устной или письменной форме, может проводиться в один или несколько этапов (состоять из одной и более частей).

На подготовку устного ответа или оформление письменного ответа на вопросы экзаменационного билета отводится не более трех часов. Для подготовки ответа аспирант использует экзаменационные листы, которые хранятся после экзамена в личном деле аспиранта.

На экзаменах может быть разрешено пользование справочниками и другой учебной, учебно-методической и научной литературой, если это предусмотрено Программой ГИА.

При письменной форме сдачи экзамена, после проверки ГЭК представленного обучающимся ответа, при необходимости, может проводиться дополнительно собеседование членов ГЭК с аспирантами.

Результаты экзамена объявляются:

– в день проведения экзамена после оформления протоколов заседаний ГЭК для проводимых в устной форме;

– на следующий рабочий день после дня проведения и оформления протоколов заседаний ГЭК – проводимых в письменной форме.

На каждого аспиранта заполняется протокол приема государственного экзамена по каждому этапу, в который вносятся вопросы, содержание заданий или предложенного в ОПОП ВО оценочного средства и дополнительные вопросы членов ГЭК. Каждый из листов протокола приема государственного экзамена подписывается всеми присутствующими на экзамене членами ГЭК и секретарем.

Аспирант, получивший по результатам государственного экзамена оценку «неудовлетворительно», не допускается к представлению и защите научного доклада.

4.3 Содержание государственного экзамена.

Содержанием специальности 02.00.04 Физическая химия являются:

- общие законы, определяющих строение веществ;
- направление и скорость химических превращений при различных внешних условиях;
- количественные взаимодействия между химическим составом, структурой вещества и его свойствами;
- учение о строении молекул вещества;
- химическая термодинамика и химическая кинетика.

4.4 Перечень экзаменационных вопросов

1. Строение вещества

1.1. *Основы классической теории химического строения.* Основные положения классической теории химического строения. Структурная формула молекулы. Изомерия. Конформации молекул. Связь строения и свойств молекул.

1.2. *Физические основы учения о строении молекул.* Механическая модель молекулы. Потенциалы парных взаимодействий. Методы молекулярной механики и молекулярной динамики при анализе строения молекул.

Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Стационарное уравнение Шредингера для свободной молекулы. Адиабатическое приближение. Электронное волновое уравнение.

Потенциальные кривые и поверхности потенциальной энергии. Их общая структура и различные типы. Равновесные конфигурации молекул. Структурная изомерия. Оптические изомеры.

Колебания молекул. Нормальные колебания, амплитуды и частоты колебаний, частоты основных колебательных переходов. Колебания с большой амплитудой.

Вращение молекул. Различные типы молекулярных волчков. Вращательные уровни энергии.

Электронное строение атомов и молекул. Одноэлектронное приближение. Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Правило Хунда.

Электронная плотность. Распределение электронной плотности в двухатомных молекулах. Корреляционные орбитальные диаграммы. Теорема Купманса. Пределы применимости одноэлектронного приближения.

Интерпретация строения молекул на основе орбитальных моделей и исследования распределения электронной плотности. Локализованные молекулярные орбитали. Гибридизация.

Представления о зарядах на атомах и порядках связей. Различные методы выделения атомов в молекулах. Корреляции дескрипторов электронного строения и свойств молекул. Индексы реакционной способности. Теория граничных орбиталей.

1.3. *Симметрия молекулярных систем.* Точечные группы симметрии молекул. Понятие о представлениях групп и характерах представлений. Общие свойства симметрии волновых функций и потенциальных поверхностей молекул. Классификация квантовых состояний атомов и молекул по симметрии. Симметрия атомных и молекулярных орбиталей, s - и p -орбитали. p -Электронное приближение.

Влияние симметрии равновесной конфигурации ядер на свойства молекул и их динамическое поведение. Орбитальные корреляционные диаграммы. Сохранение орбитальной симметрии при химических реакциях.

1.4. *Электрические и магнитные свойства.* Дипольный момент и поляризуемость молекул. Магнитный момент и магнитная восприимчивость. Эффекты Штарка и Зеемана. Магнитно-резонансные методы исследования строения молекул. Химический сдвиг.

Оптические спектры молекул. Вероятности переходов и правила отбора при переходах между различными квантовыми состояниями молекул. Связь спектров молекул с их строением. Определение структурных характеристик молекул из спектроскопических данных.

1.5. *Межмолекулярные взаимодействия.* Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий. Молекулярные комплексы. Ван-дер-ваальсовы молекулы. Кластеры атомов и молекул. Водородная связь. Супермолекулы и супрамолекулярная химия.

1.6. *Основные результаты и закономерности в строении молекул.* Строение молекул простых и координационных неорганических соединений. Полиядерные комплексные соединения. Строение основных типов органических и элементоорганических соединений. Соединения включения. Полимеры и биополимеры.

1.7. *Строение конденсированных фаз.* Структурная классификация конденсированных фаз.

Идеальные кристаллы. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах. Кристаллы с неполной упорядоченностью. Доменные структуры.

Симметрия кристаллов. Кристаллографические точечные группы симметрии, типы решеток, сингонии. Понятие о пространственных группах кристаллов. Индексы кристаллографических граней.

Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов. Цепочечные, каркасные и слоистые структуры.

Строение твердых растворов. Упорядоченные твердые растворы. Аморфные вещества. Особенности строения полимерных фаз.

Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов. Поверхность Ферми. Различные типы проводимости. Колебания в кристаллах. Фононы.

Жидкости. Мгновенная и колебательно-усредненная структура жидкости. Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Флуктуации и корреляционные функции. Структура простых жидкостей. Растворы неэлектролитов. Структура воды и водных растворов. Структура жидких электролитов.

Мицеллообразование и строение мицелл.

Мезофазы. Пластические кристаллы. Жидкие кристаллы (нематики, смектики, холестерики и др.).

1.8. Поверхность конденсированных фаз.

Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей, структура границы раздела конденсированных фаз. Молекулы и кластеры на поверхности. Структура адсорбционных слоев.

2. Химическая термодинамика

2.1. 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.

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.

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.

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.

2.2. Элементы статистической термодинамики. Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые G - и m -пространства. Эргодическая гипотеза. Термодинамическая вероятность и ее связь с энтропией. Распределение Максвелла – Больцмана.

Статистические средние значения макроскопических величин. Ансамбли Гиббса. Микроканоническое и каноническое распределения. Расчет числа состояний в квазиклассическом приближении.

Каноническая функция распределения Гиббса. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция. 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.

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.

2.3. *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. Элементы синергетики. Теорема Пригожина. Термодиффузия и ее описание в неравновесной термодинамике.

2.4. *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. Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия. Зонная плавка. Осмотические явления. Парциальные молярные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса – Дюгема. Функция смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства. 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.

2.5. *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. Хроматография, различные ее типы (газовая, жидкостная, противоточная и др.).

2.6. *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. Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и 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. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты.

3. Кинетика химических реакций

3.1. 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.

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.

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).

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.

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.

Различные типы химических реакций. Мономолекулярные реакции в газах, схема Линдемана – Христиансена. Теория РРКМ. 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. Эксимеры и эксиплексы. Изменение физических и химических свойств молекул при электронном возбуждении. Квантовый выход. Закон Эйнштейна – Штарка.

Электрохимические реакции. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Теория Гуи – Чапмена – Грэма.

Скорость и стадии электродного процесса. Поляризация электродов. Полярография. Ток обмена и перенапряжение. Зависимость скорости стадии разряда от строения двойного слоя.

3.2. 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. Функции кислотности Гаммета. 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.

Мицеллярный катализ. Элементы нанотехнологии.

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.

4.5 *Оценочные средства государственного экзамена (Приложение к программе государственной итоговой аттестации: Фонды оценочных средств).*

4.6 *Учебно-методическое и информационное обеспечение подготовки к государственному экзамену.*

а) основная литература

1. 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.
2. 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. Ч. 1 / ; пер. с англ. И. А. Успенский [и др.] ; под ред. В. В. Лунина и О. М. Полторака .— М. : Мир, 2007 .— 494 с. : ил. — ISBN 5-03-003786-1 : 0,00.
3. 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>>.
4. Буданов, Вадим Васильевич (доктор химических наук). Химическая кинетика [Текст] : Рекомендовано ФГБОУ ВПО "Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева" в качестве учебного пособия для студентов вузов, обучающихся по направлениям подготовки "Химическая технология", "Биотехнология", "Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии" / В. В. Буданов, Т. Н. Ломова, В. В. Рыбкин .— Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2014 .— 283 с. : ил. ; 21 .— (Учебник для вузов, Специальная литература) .— На 4-й с. обложки авторы: В. В. Буданов - доктор химических наук, профессор, заслуженный деятель науки Российской Федерации, действительный член Российской академии естественных наук, Т. Н. Ломова - доктор химических наук, профессор, лауреат премии Правительства Российской Федерации в области науки и техники, действительный член Российской академии естественных наук, В. В. Рыбкин - доктор химических наук, профессор. — Доступ к электронной версии этой книги на www.e.lanbook.com .— Библиография: с. 276-280 .— ISBN 978-5-8114-1542-7, 700.
5. Афанасьев, Борис Николаевич. Физическая химия : учебник / Б. Н. Афанасьев, Ю. П. Акулова .— Москва : Лань, 2012 .— 464 с. : ил .— Допущено УМО по образованию в области химической

технологии и биотехнологии в качестве учебного пособия для студентов вузов, обучающихся по направлениям «Химическая технология», «Биотехнология» и «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии». — ISBN 978-5-8114-1402-4 : 694 p. 98 к. — <URL:http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=4312>.

6. 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
7. Симонов, Валентин Петрович. Педагогика и психология высшей школы [Текст] : инновационный курс для подготовки магистров : учебное пособие : рекомендовано УМО по психолого-педагогическим наукам Московского государственного областного университета для обучения магистрантов / В. П. Симонов .— Москва : Вузовский учебник : ИНФРА-М, 2016 .— 319, [1] с. : ил. ; 22 .— (Вузовский учебник : ВУ) .— На обороте титульного листа автор: Симонов В. П., заслуженный работник высшей школы Российской Федерации, доктор педагогических наук, профессор .— На титульном листе: Электронно-библиотечная система znanium.com .— На титульном листе: Соответствует Федеральному государственному образовательному стандарту 3-го поколения .— Библиография в конце глав .— ISBN 978-5-9558-0336-4 ((Вузовский учебник)) .— ISBN 978-5-16-009189-1 ((ИНФРА-М)) .

б) дополнительная литература

1. Задачи по физической химии : Учебное пособие / В. В. Еремин, С. И. Каргов, И. А. Успенская и др. — М. : Экзамен, 2003 .— 318 с. : ил. — Библиогр. : с. 316-318 .— ISBN 5-94692-155-X : 100,00 .— 88,41.
2. Зеер, Эвальд Фридрихович (доктор психологических наук). Психология профессионального образования [Текст] : учебник : допущено Учебно-методическим объединением по профессионально-педагогическому образованию в качестве учебника для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению подготовки "Профессиональное обучение (по отраслям)" / Э. Ф. Зеер .— 2-е издание, исправленное и дополненное .— Москва : Издательский центр "Академия", 2013 .— 411, [1] с. : ил., табл. ; 22 см .— (Высшее профессиональное образование, Профессиональное обучение) (Бакалавриат) .— Библиография: с. 405-408 .— ISBN 978-5-7695-5895-5 (в пер.) .
3. Темкин, Олег Наумович. Гомогенный металлокомплексный катализ [Текст] : кинетические аспекты : [монография] / О. Н. Темкин .— М. : Академкнига, 2008 .— 918 с. : ил., табл. ; 24 .— Библиогр. в конце гл. .— ISBN 978-5-94628-336-6 (в пер.) , 400.
4. Кравченко, Альберт Иванович. Психология и педагогика : Учебник .— 1 .— Москва : ООО "Научно-издательский центр ИНФРА-М", 2016 .— 352 с.— ISBN 9785160068701 .— <URL:<http://znanium.com/go.php?id=543600>>.
5. Шарипов, Ф. В. Педагогика и психология высшей школы [Электронный ресурс] : Учебное пособие / Ф. В. Шарипов .— Педагогика и психология высшей школы, 2019-04-20 .— Москва : Логос, 2012 .— 448 с. — Книга находится в премиум-версии ЭБС IPR BOOKS. .— ISBN 978-5-98704-587-9 .

г) перечень лицензионного программного обучения

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

д) Интернет-ресурсы

1. Аспирантура. Портал для аспирантов - [Электронный ресурс] URL: <http://www.aspirantura.spb.ru/>
2. В помощь аспирантам - [Электронный ресурс] URL: <http://postgrad.samgtu.ru/node/54>
3. В помощь аспирантам и соискателям ученых степеней - [Электронный ресурс] URL: <http://www.aspirinby.org/>
4. eLIBRARY – Научная электронная библиотека <http://www.elibrary.ru/> Базы библиографических данных: <http://www.scopus.com/> Единое окно доступа к образовательным ресурсам: <http://window.edu.ru/window/>
5. Электронно-библиотечная система издательства «Лань» <http://e.lanbook.com/>
6. Электронно-библиотечная система Znanium.com www.znanium.com
7. Полнотекстовая электронная версия журнала Science издательства American Association for the Advancement of Science (AAAS), а также информационная база Science Now. Содержит обзоры новейших разработок в области естественных и прикладных наук. Статьи представлены в форматах html и pdf с 1997 по 2008 год. Springer <http://ebooks.springerlink.com>
8. Коллекция полнотекстовых электронных книг на иностранных языках издательства Springer Журналы Американского химического общества <http://pubs.acs.org>
9. Полнотекстовые электронные журналы на английском языке издательства American Chemical Society (ACS)
10. Министерство образования и науки РФ [Электронный ресурс]. – Режим доступа : <http://mon.gov.ru>
11. Федеральный справочник «Образование в России» [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://federalbook.ru/projects/fso/fso.html>
12. Российский общеобразовательный портал [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.school.edu.ru>
13. Российский портал открытого образования [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.openet.edu.ru>
14. Естественно-научный образовательный портал [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.en.edu.ru>
15. Федеральная служба по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://www1.fips.ru/wps/wcm/connect/content_ru/ru
16. Журнал «Высшее образование сегодня» [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.hetoday.org>
17. Электронная библиотека: библиотека диссертаций [Электронный ресурс]. – Режим доступа: www.diss.rsl.ru

4.7 Материально-техническое обеспечение государственного экзамена.

Лекционная аудитория № К202 оснащена специализированной мебелью и техническими средствами обучения: меловая доска, мобильный проекционный экран, портативный проектор, ноутбук, точка доступа Wi-Fi, справочной и методической литературой.

5. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ НАУЧНОГО ДОКЛАДА ОБ ОСНОВНЫХ РЕЗУЛЬТАТАХ ПОДГОТОВЛЕННОЙ НАУЧНО-КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЫ (ДИССЕРТАЦИИ)

5.1. Форма представления научного доклада

Научные исследования аспирантов завершаются защитой научного доклада, который является заключительным этапом проведения итоговой аттестации.

В научном докладе дается результат исследований аспиранта, содержится решение задачи, имеющей существенное значение для соответствующей отрасли знаний, изложены научно обоснованные решения и разработки, имеющие существенное значение для развития науки.

Научный доклад должен содержать новые научные результаты и положения, выдвигаемые для публичной защиты. Предложенные аспирантом решения должны быть аргументированы и оценены по сравнению с другими известными решениями.

5.2 Научно-квалификационная работа. Порядок представления и защиты научного доклада

Научно-квалификационная работа (далее – НКР) должна быть представлена в виде специально подготовленной рукописи следующей структуры: титульный лист; оглавление с указанием номеров страниц; введение; основная часть (главы, параграфы, пункты, подпункты); заключение, содержащее итоги выполненного исследования, рекомендации; список использованных источников; приложения.

Введение к научно-квалификационной работе включает в себя следующие основные структурные элементы: актуальность темы исследования; степень разработанности темы исследования; цель и задачи; научную новизну; теоретическую и практическую значимость работы; методологию и методы исследования; положения, выносимые на защиту; степень достоверности и апробацию результатов.

Основная часть должна быть разделена на главы и параграфы или разделы и подразделы, которые нумеруются арабскими цифрами.

В заключении излагают итоги выполненного исследования, рекомендации, перспективы дальнейшей разработки темы.

Научный доклад – документ, в котором аспирант излагает основное содержание результатов НКР. Научный доклад имеет следующую структуру: титульный лист, основной текст, который содержит общую характеристику выполненной работы, описание основного содержания работы, заключение, список работ, опубликованных автором по теме НКР.

Общая характеристика работы включает в себя следующие основные структурные элементы: актуальность темы исследования; степень ее разработанности; цель и задачи; научную новизну; теоретическую и практическую значимость работы; методологию и методы исследования; положения, выносимые на защиту; степень достоверности и апробацию результатов.

Основное содержание работы кратко раскрывает содержание глав (разделов) НКР.

В заключении научного доклада излагают итоги данного исследования, рекомендации и перспективы дальнейшей разработки темы.

Список работ, опубликованных автором по теме диссертации, оформляют в соответствии с требованиями ГОСТ 7.1.

Объем рукописи научного доклада определяется целью, задачами и методами исследования, должен составлять не менее 15 и не более 25 страниц.

Отличительными признаками доклада являются: передача информации в устной форме; публичный характер выступления; четкие формулировки, умение в сжатой форме изложить ключевые положения исследуемого вопроса и сделать выводы.

Допуск к защите научного доклада осуществляется по результатам предварительной защиты на расширенном заседании кафедры, ответственной за реализацию ОПОП ВО.

Защита научного доклада проходит в сроки, определенные в учебном плане.

Процесс защиты научно-квалификационной работы включает в себя:

- краткий доклад автора;
- выступление и вопросы членами ГЭК и присутствующими на защите;
- оглашение рецензий и отзыва научного руководителя.

Автор научно-квалификационной работы делает сообщение продолжительностью до 20 минут, в котором в сжатой форме обосновывает актуальность темы исследования, излагает основное содержание, результаты исследования и выводы, обосновывает практическую значимость исследования.

По окончании сообщения автор научного доклада отвечает на вопросы.

Далее заслушивается выступление рецензентов (оглашается рецензия отсутствующего на заседании рецензента). Выпускнику предоставляется слово для ответа рецензентам.

Заслушивается отзыв научного руководителя, содержащий оценку теоретической подготовленности исполнителя научного доклада, его инициативности и самостоятельности при решении исследовательских задач, оценку полученных результатов исследования. Форма отзыва научного руководителя приведена в Приложении 1.

Рекомендуемая общая продолжительность защиты научного доклада – 45 минут.

Оценка выставляется на основании отзыва научного руководителя, рецензий и оценок членов ГЭК.

На каждого аспиранта, представляющего научный доклад, заполняется протокол, в который вносятся мнения членов ГЭК о защищаемом научном исследовании, уровне сформированности компетенций, знаниях и умениях, выявленных в процессе ГИА, перечень заданных вопросов и характеристика ответов на них, а также запись особых мнений. Протокол подписывается теми членами ГЭК, которые присутствовали на представлении научного доклада.

5.3 *Оценочные средства представления научного доклада (Приложение к программе государственной итоговой аттестации: Фонды оценочных средств).*

5.4 *Материально-техническое обеспечение представления научного доклада*

Лекционная аудитория № К202 оснащена специализированной мебелью и техническими средствами обучения: меловая доска, мобильный проекционный экран, портативный проектор, ноутбук, точка доступа Wi-Fi, справочной и методической литературой.

6. ОСОБЕННОСТИ ПРОВЕДЕНИЯ ГОСУДАРСТВЕННОЙ ИТОГОВОЙ АТТЕСТАЦИИ ДЛЯ АСПИРАНТОВ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ И ИНВАЛИДОВ

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 программе государственной итоговой аттестации**

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки

Направленность программы:
Физическая химия

Отрасль науки:
Химические науки

Квалификация:
Исследователь. Преподаватель-исследователь

Форма обучения:
очная

Сургут, 2018

ЭТАП: ПРОВЕДЕНИЕ ГОСУДАРСТВЕННОГО ЭКЗАМЕНА

1. Государственная итоговая аттестация на этапе проведения государственного экзамена призвана определить степень сформированности следующих компетенций выпускников аспирантуры:

Универсальная компетенция 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;

Универсальная компетенция УК-2

способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки		
Знает	Умеет	Владеет
методы критического анализа и оценки современных научных достижений, методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач	анализировать собранный эмпирический материал и делать достоверные выводы	навыком обоснованного выбора экспериментальных методов и средств решения сформулированных задач по направленности физическая химия;

Универсальная компетенция УК-3

готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач		
Знает	Умеет	Владеет
основные современные направления в области физической химии, ее роль в развитии общества,	планировать научно-исследовательскую работу в области физической химии;	систематическими и углубленными знаниями по выбранной направленности подготовки; навыками профессионального мышления;

Универсальная компетенция УК-4

готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках		
Знает	Умеет	Владеет
основные источники научной информации и требования к представлению информационных материалов.	обосновать новизну и значимость собственного исследования;	логикой научного исследования; методами поиска научной информации;

Универсальная компетенция УК-5

способностью планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития		
--	--	--

Знает	Умеет	Владеет
методы достижения поставленной цели при выполнении научного исследования;	критически анализировать полученную информацию и представлять результаты собственных научных исследований;	навыками публичных выступлений и ведения научной дискуссии;

Общепрофессиональная компетенция 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;

Общепрофессиональная компетенция ОПК-2

Готовностью организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук

Знает	Умеет	Владеет
методы достижения поставленной цели при выполнении научного исследования в области физической химии;	самостоятельно ставить цель и выбирать пути ее достижения при анализе и обобщении информации;	навыками обработки экспериментальных данных физических экспериментов с помощью современного программного обеспечения;

Общепрофессиональная компетенция ОПК-3

готовность к преподавательской деятельности по основным программам высшего образования

Знает	Умеет	Владеет
классические и современные методы решения задач по тематике научных исследований;	вести корректную дискуссию в процессе представления материалов, отстаивать собственную научную концепцию;	навыками подготовки и представления доклада или развернутого выступления по тематике, связанной с направлением научного исследования;

Профессиональная компетенция ПК-1

способностью владеть методологией теоретических и экспериментальных исследований, адаптировать и обобщать их результаты по направленности ОПОП при преподавании дисциплин в вузе

Знает	Умеет	Владеет
цели, задачи, основные разделы, объекты и методы физической химии;	самостоятельно получать экспериментальные данные по выбранной тематике исследования	опытом применения современных методов в анализе веществ и материалов;

Профессиональная компетенция ПК-2

способностью экспериментально определять термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов		
Знает	Умеет	Владеет
важнейшие методы исследования физико-химических процессов;	использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования;	методами перспективного планирования, подготовки и проведения НИР, обработки результатов экспериментальных исследований в области физической химии;

Профессиональная компетенция 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
теоретические основы современных методов математической и статистической обработки химических данных;	оформлять и представлять результаты научных исследований.	основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, а также методами изложения информации в виде научных публикаций;

Профессиональная компетенция 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

Профессиональная компетенция 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,	определять механизмы сложных химических процессов, владеть законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных	навыками определения механизмы сложных химических процессов, владеть законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных

межмолекулярных и межчастичных взаимодействий	и межчастичных взаимодействий	и межчастичных взаимодействий
---	-------------------------------	-------------------------------

2. Критерии оценки государственного экзамена

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

Дескриптор компетенции	Показатель оценивания	Оценка	Критерий оценивания
Знает	основные достижения и тенденции развития физической химии, методы критического анализа и оценки современных научных достижений, методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, основные современные направления в области физической химии, ее роль в развитии общества, основные источники научной информации и требования к представлению информационных материалов, методы достижения поставленной цели при выполнении научного исследования, достижения структурного анализа, изучения свойств и создания модельных систем для исследования физико-химических процессов, классические и современные методы решения задач по тематике научных исследований, цели, задачи, основные разделы, объекты и методы физической химии, важнейшие методы исследования физико-химических процессов, теоретические основы современных методов математической и	Отлично	сформированные представления о требованиях к формированию и реализации ООП в системе высшего образования
		Хорошо	сформированные представления о требованиях к формированию и реализации учебного плана в системе высшего образования
		Удовлетворительно	сформированные представления о требованиях, предъявляемых к обеспечению учебной дисциплины и преподавателю, ее реализующему в системе ВО
		Неудовлетворительно	сформированные представления о требованиях к формированию и реализации ООП в системе высшего образования

	<p>статистической обработки химических данных, 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>		
Умеет	<p>интерпретировать результаты эксперимента на основе современного научного знания, делать заключение на основе полученных экспериментальных данных, анализировать собранный эмпирический материал и делать достоверные выводы, планировать научно-исследовательскую работу в области физической химии, обосновать новизну и значимость собственного исследования, критически анализировать полученную информацию и представлять результаты собственных научных исследований, в рамках поставленной задачи самостоятельно планировать экспериментальную работу, самостоятельно ставить цель и выбирать пути ее достижения при анализе и обобщении информации, вести корректную дискуссию в процессе представления материалов, отстаивать собственную научную концепцию, самостоятельно получать экспериментальные данные</p>	Отлично	отбор и использование методов преподавания с учетом специфики направления подготовки
		Хорошо	отбор и использование методов с учетом специфики направленности (профиля) подготовки
		Удовлетворительно	отбор и использование методов преподавания с учетом специфики преподаваемой дисциплины
		Неудовлетворительно	отбор и использование методов, не обеспечивающих освоение дисциплин

	<p>по выбранной тематике исследования, использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования, оформлять и представлять результаты научных исследований, 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.</p>		
Владеет	<p>основными методами химических и физико-химических анализов, навыком обоснованного выбора экспериментальных методов и средств решения сформулированных задач по направленности физическая химия, систематическими и углубленными знаниями по выбранной направленности подготовки; навыками профессионального мышления, логикой научного исследования; методами поиска научной информации, навыками публичных выступлений и ведения научной дискуссии,</p>	Отлично	проектирует образовательный процесс в рамках учебного плана
		Хорошо	проектирует образовательный процесс в рамках модуля
		Удовлетворительно	проектирует образовательный процесс в рамках дисциплины
		Неудовлетворительно	проектируемый образовательный процесс не приобретает целостности

	<p>современными методами математической и статистической обработки экспериментальных данных, навыками обработки экспериментальных данных физических экспериментов с помощью современного программного обеспечения, навыками подготовки и представления доклада или развернутого выступления по тематике, связанной с направлением научного исследования, опытом применения современных методов в анализе веществ и материалов, методами перспективного планирования, подготовки и проведения НИР, обработки результатов экспериментальных исследований в области физической химии, основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, а также методами изложения информации в виде научных публикаций, 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.</p>		
--	---	--	--

3. Оценочные материалы сформированности компетенций

№ п/п	Проверяемые компетенции	Формулировка оценочного задания по психологии	Методические рекомендации по выполнению оценочных заданий
1.	УК-2; УК-4; ОПК-1; ОПК-2; ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4, ПК-5	Вычислить изменение энтропии при смешении 0,001 м ³ водорода с 0,0005 м ³ метана, если исходные газы и образующаяся смесь газов находится при 25 °С и 0,912·10 ⁵ Па.	Приступая к решению задачи, хорошо вникните в ее смысл и постановку вопроса. Установите, все ли данные, необходимые для решения задачи, приведены. Недостающие данные можно найти в справочниках.
2.	УК-2; УК-4; ОПК-1; ОПК-2; ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4, ПК-5	Найти изменение энтропии при изотермическом сжатии 1 моль паров бензола при температуре 80°С и давлении от 0,4053·10 ⁵ до 1,013·10 ⁵ Па с последующей конденсацией и охлаждением жидкого бензола до 60°С	Приступая к решению задачи, хорошо вникните в ее смысл и постановку вопроса. Установите, все ли данные, необходимые для решения задачи, приведены. Недостающие данные можно найти в справочниках.
3.	УК-2; УК-4; ОПК-1; ОПК-2; ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4, ПК-5	Определить температуру, при которой давление СО ₂ над СаСО ₃ будет равно 10 ⁵ Па, если при 1000°К давление составляет 11152 Па. Тепловой эффект реакции разложения карбоната при этой температуре равен 162,93 кДж/моль.	Приступая к решению задачи, хорошо вникните в ее смысл и постановку вопроса. Установите, все ли данные, необходимые для решения задачи, приведены. Недостающие данные можно найти в справочниках.
4.	УК-2; УК-4; ОПК-1; ОПК-2; ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4, ПК-5	Вывести уравнение температурной зависимости истинной изобарной теплоемкости паров воды и рассчитать значение теплоемкости при T = 1000°С.	Приступая к решению задачи, хорошо вникните в ее смысл и постановку вопроса. Установите, все ли данные, необходимые для решения задачи, приведены. Недостающие данные можно найти в справочниках.
5.	УК-2; УК-4; ОПК-1; ОПК-2; ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4, ПК-5	Достаточно ли емкости тигля 1,4 л, чтобы расплавить в нем 10 кг олова. Температурный коэффициент давления составляет: dT/dP = 0,0033 град/атм. Все необходимые данные взять в справочнике. (1 Дж = 9,86 см ³ *атм)	Приступая к решению задачи, хорошо вникните в ее смысл и постановку вопроса. Установите, все ли данные, необходимые для решения задачи, приведены. Недостающие данные можно найти в справочниках.
6.	УК-2; УК-4; ОПК-1; ОПК-2; ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4, ПК-5	Вывести температурную зависимость теплового эффекта реакции N _{2(r)} + O _{2(r)} = 2NO _(r)	Приступая к решению задачи, хорошо вникните в ее смысл и постановку вопроса. Установите, все ли данные, необходимые для решения задачи, приведены. Недостающие данные можно найти в справочниках.
7.	УК-2; УК-4; ОПК-1; ОПК-2; ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4, ПК-5	Определить удельное сопротивление, удельную и эквивалентную электропроводность 1 М раствора нитрата натрия в ячейке с электродами площадью 1,6 см ² и расстоянием между ними 8 мм, если сопротивление раствора составляет 30 Ом.	Приступая к решению задачи, хорошо вникните в ее смысл и постановку вопроса. Установите, все ли данные, необходимые для решения задачи, приведены. Недостающие данные можно найти в справочниках.
8.	УК-2; УК-4; ОПК-1; ОПК-2; ПК-1; ПК-	Температура плавления бензола 5,53 °С при атмосферном давлении, разность молярных объемов бензола в жидком и	Приступая к решению задачи, хорошо вникните в ее смысл и постановку вопроса. Установите, все ли данные, необходимые для решения

	2; ПК-3; ПК-4, ПК-5	твердом состояниях $\Delta V = 10,28 \cdot 10^{-6}$ м ³ /моль. При какой температуре будет плавиться бензол под давлением $1,013 \cdot 10^7$ Па. Скрытая теплота плавления бензола 9,95 кДж/моль	задачи, приведены. Недостающие данные можно найти в справочниках.
9.	УК-2; УК-4; ОПК-1; ОПК-2; ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4, ПК-5	Молярная электропроводность раствора бензойной кислоты при $T = 25^\circ\text{C}$, с концентрацией 0,135 моль/л равна $8,1 \cdot 10^{-4}$ Ом ⁻¹ м ² /моль. Рассчитайте степень диссоциации и константу диссоциации электролита.	Приступая к решению задачи, хорошо вникните в ее смысл и постановку вопроса. Установите, все ли данные, необходимые для решения задачи, приведены. Недостающие данные можно найти в справочниках.
10.	УК-2; УК-4; ОПК-1; ОПК-2; ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4, ПК-5	Температура кипения чистого брома при ст. условиях составляет $59,2^\circ\text{C}$. Оцените давление паров брома при 15°C . рассчитайте энтальпию плавления брома, если энтальпия возгонки равна 38,94 кДж/моль и сравните ее с табличным значением ($\Delta H_{\text{пл}} = 9,44$ кДж/моль)	Приступая к решению задачи, хорошо вникните в ее смысл и постановку вопроса. Установите, все ли данные, необходимые для решения задачи, приведены. Недостающие данные можно найти в справочниках.
11.	УК-2; УК-4; ОПК-1; ОПК-2; ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4, ПК-5	Вычислить давление, необходимое для понижения температуры замерзания воды на 1° , и температуру, при которой будет плавиться лед при повышении давления на 1 атм. При 0°C удельная теплота плавления льда равна $333,5 \cdot 10^3$ Дж/кг, плотность воды $0,9998 \cdot 10^3$ кг/м ³ , плотность льда $0,9168 \cdot 10^3$ кг/м ³ .	Приступая к решению задачи, хорошо вникните в ее смысл и постановку вопроса. Установите, все ли данные, необходимые для решения задачи, приведены. Недостающие данные можно найти в справочниках. Используем уравнение Клапейрона для фазовых превращений в однокомпонентных системах:
12.	УК-2; УК-4; ОПК-1; ОПК-2; ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4, ПК-5	Рассчитайте электродные потенциалы, ЭДС гальванического элемента $(-)\text{Zn} \text{ZnSO}_4 (c=0,5\text{M}) \text{CuSO}_4 (c=1\text{M}) \text{Cu}(+)$, изменение энергии Гиббса ΔG° и константу равновесия реакции, протекающей в нем при замыкании цепи ($T=25^\circ\text{C}$).	Приступая к решению задачи, хорошо вникните в ее смысл и постановку вопроса. Установите, все ли данные, необходимые для решения задачи, приведены. Недостающие данные можно найти в справочниках.

Комплектование заданий и вопросов в экзаменационном билете (примеры)

Бюджетное учреждение высшего образования
Ханты-Мансийского автономного округа – Югры
«Сургутский государственный университет»

УТВЕРЖДАЮ

Проректор
_____ ФИО

«__» _____ 20__ г.

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки
Направленность программы:
Физическая химия

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ЭКЗАМЕН

Билет № 1

1. Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Стационарное уравнение Шредингера для свободной молекулы. Адиабатическое приближение. Электронное волновое уравнение.
2. Фотохимические реакции. Закон фотохимической эквивалентности. Квантовый выход.
3. Второй закон термодинамики. Энтропия и ее изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно – Клаузиуса. Различные шкалы температур.

Утвержден на заседании кафедры химии

«__» _____ 201__ г. протокол №

Зав. кафедрой _____

Бюджетное учреждение высшего образования
Ханты-Мансийского автономного округа – Югры
«Сургутский государственный университет»

УТВЕРЖДАЮ

Проректор

_____ ФИО

«__» _____ 20__ г.

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки
Направленность программы:
Физическая химия

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ЭКЗАМЕН

Билет № 2

1. Химическое равновесие. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции.
2. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты.
3. Энергия активации. Уравнение Аррениуса. Методы определения энергии активации.

Утвержден на заседании кафедры химии

«__» _____ 201__ г. протокол №__

Зав. кафедрой _____

Бюджетное учреждение высшего образования
Ханты-Мансийского автономного округа – Югры
«Сургутский государственный университет»

УТВЕРЖДАЮ

Проректор
_____ ФИО

«__» _____ 20__ г.

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки
Направленность программы:
Физическая химия

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ЭКЗАМЕН

Билет № 3

1. Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца. Уравнения Максвелла. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов.
2. Адсорбция. Адсорбент, адсорбат. Виды адсорбции. Структура поверхности и пористость адсорбента. Локализованная и делокализованная адсорбция.
3. Уравнение состояния идеального газа. Парциальное давление. Закон Дальтона.

Утвержден на заседании кафедры химии

«__» _____ 201__ г. протокол № _____

Зав. кафедрой _____

Бюджетное учреждение высшего образования
Ханты-Мансийского автономного округа – Югры
«Сургутский государственный университет»

УТВЕРЖДАЮ

Проректор
_____ ФИО

«__» _____ 20__ г.

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки
Направленность программы:
Физическая химия

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ЭКЗАМЕН

Билет № 4

1. Основные положения классической теории химического строения. Структурная формула молекулы. Изомерия. Конформации молекул. Связь строения и свойств молекул.
2. Второе начало термодинамики. Свободная энергия Гиббса и свободная энергия Гельмгольца.
3. Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов. Поверхность Ферми. Различные типы проводимости. Колебания в кристаллах. Фононы.

Утвержден на заседании кафедры химии

«__» _____ 201__ г. протокол №

Зав. кафедрой _____

Бюджетное учреждение высшего образования
Ханты-Мансийского автономного округа – Югры
«Сургутский государственный университет»

УТВЕРЖДАЮ

Проректор

_____ ФИО

«__» _____ 20__ г.

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки
Направленность программы:
Физическая химия

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ЭКЗАМЕН

Билет № 5

1. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты.
2. Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия. Зонная плавка. Осмотические явления. Парциальные молярные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса – Дюгема.
3. Химическое равновесие. Закон действия масс для обратимых процессов. Константа химического равновесия

Утвержден на заседании кафедры химии

«__» _____ 201__ г. протокол №__

Зав. кафедрой _____

Бюджетное учреждение высшего образования
Ханты-Мансийского автономного округа – Югры
«Сургутский государственный университет»

УТВЕРЖДАЮ

Проректор

ФИО

«__» _____ 20__ г.

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки
Направленность программы:
Физическая химия

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ЭКЗАМЕН

Билет № 6

1. Гетерогенный катализ. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Удельная и атомная активность. Селективность катализаторов. Роль адсорбции в кинетике гетерогенных каталитических реакций.
2. Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы ее определения.
3. Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации. Химическая кинетика, порядок и молекулярность реакций.

Утвержден на заседании кафедры химии

«__» _____ 201__ г. протокол №

Зав. кафедрой _____

Бюджетное учреждение высшего образования
Ханты-Мансийского автономного округа – Югры
«Сургутский государственный университет»

УТВЕРЖДАЮ

Проректор
_____ ФИО

«__» _____ 20__ г.

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки
Направленность программы:
Физическая химия

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ЭКЗАМЕН

Билет № 7

1. 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.
2. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики. Статистическая термодинамика реальных систем.
3. Адсорбция на твёрдых поверхностях. Уравнение Фрейндлиха, уравнение Ленгмюра.

Утвержден на заседании кафедры химии

«__» _____ 201__ г. протокол № _____

Зав. кафедрой _____

Бюджетное учреждение высшего образования
Ханты-Мансийского автономного округа – Югры
«Сургутский государственный университет»

УТВЕРЖДАЮ

Проректор

ФИО

«__» _____ 20__ г.

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки
Направленность программы:
Физическая химия

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ЭКЗАМЕН

Билет № 8

1. Теория активных столкновений. Сечение химических реакций. Формула Траутца – Льюиса. Расчет предэкспоненциального множителя по молекулярным постоянным. Стерический фактор.
2. 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.
3. Ионная сила растворов, активность, коэффициент активности электролитов.

Утвержден на заседании кафедры химии

«__» _____ 201__ г. протокол № _____

Зав. кафедрой _____

Бюджетное учреждение высшего образования
Ханты-Мансийского автономного округа – Югры
«Сургутский государственный университет»

УТВЕРЖДАЮ

Проректор
_____ ФИО

«__» _____ 20__ г.

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки
Направленность программы:
Физическая химия

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ЭКЗАМЕН

Билет № 9

1. 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.
2. Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Равновесие жидкость – пар в двухкомпонентных системах. Законы Гиббса – Коновалова. Азеотропные смеси.
3. Принцип действия катализаторов. Ферментный катализ и его особенности.

Утвержден на заседании кафедры химии

«__» _____ 201__ г. протокол № _____

Зав. кафедрой _____

Бюджетное учреждение высшего образования
Ханты-Мансийского автономного округа – Югры
«Сургутский государственный университет»

УТВЕРЖДАЮ

Проректор
_____ ФИО

«__» _____ 20__ г.

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки
Направленность программы:
Физическая химия

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ЭКЗАМЕН

Билет № 10

1. Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и 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.
2. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Лэнгмюра. Адсорбция из растворов.
3. Кинетическая теория газов. Скорость молекул и закон распределения скоростей.

Утвержден на заседании кафедры химии

«__» _____ 201__ г. протокол №

Зав. кафедрой

ЭТАП: ПРЕДСТАВЛЕНИЕ НАУЧНОГО ДОКЛАДА ОБ ОСНОВНЫХ РЕЗУЛЬТАТАХ ПОДГОТОВЛЕННОЙ НАУЧНО-КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЫ (ДИССЕРТАЦИИ).

1. Государственная итоговая аттестация на этапе представления научного доклада об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации) призвана определить степень сформированности следующих компетенций выпускников аспирантуры:

Компетенция ПК-1

способностью владеть методологией теоретических и экспериментальных исследований, адаптировать и обобщать их результаты по направленности ОПОП при преподавании дисциплин в вузе		
Знает	Умеет	Владеет
цели, задачи, основные разделы, объекты и методы физической химии	экспериментально определять термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем.	методами расчета термодинамических функций простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов

Компетенция ПК-2

способностью экспериментально определять термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов		
Знает	Умеет	Владеет
важнейшие методы исследования физико-химических процессов	определять и рассчитать параметры строения молекул, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями	методами определения и расчета параметров строения молекул.

Компетенция 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
теоретические основы современных методов математической и статистической обработки химических данных	определять термодинамические характеристики процессов на поверхности.	закономерностями адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях

Компетенция ПК-4

способностью определять термодинамические характеристики процессов на поверхности, владеть 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 механизмы сложных химических процессов.	законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий.

Компетенция 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

2. Критерии оценки представления научного доклада об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации).

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

Дескриптор компетенции	Показатель оценивания	Оценка	Критерий оценивания
Знает	цели, задачи, основные разделы, объекты и методы физической химии, важнейшие методы исследования физико-химических процессов, теоретические основы современных методов математической и статистической обработки химических данных, 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	Отлично	Все материалы, включенные в текст диссертации, объединены ведущей идеей исследования и в ходе исследования аргументированы и доказаны. Все компоненты диссертации логически взаимосвязаны.
		Хорошо	Материалы, включенные в текст диссертации, объединены ведущей идеей исследования, но в ходе исследования аргументированы и доказаны недостаточно. Компоненты диссертации логически взаимосвязаны.
		Удовлетворительно	Материалы, включенные в текст диссертации, объединены ведущей идеей исследования, но в ходе исследования плохо аргументированы и доказаны. Компоненты диссертации логически взаимосвязаны недостаточно.
		Неудовлетворительно	Материалы, включенные в текст диссертации, не объединены ведущей идеей исследования, в ходе исследования плохо аргументированы и доказаны. Компоненты диссертации логически не взаимосвязаны.

Умеет	экспериментально определять термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, определять и рассчитать параметры строения молекул, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями определять термодинамические характеристики процессов на поверхности. определять механизмы сложных химических процессов, определять механизмы сложных химических процессов, владеть законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий	Отлично	В докладе изложены актуальность избранной темы, определен объект, предмет, цель, гипотеза, задачи исследования, положения, выносимые на защиту, описана опытно-экспериментальная работа, проделанная лично автором диссертации, и даются рекомендации по использованию теоретических и прикладных результатов научного исследования.
		Хорошо	В докладе изложены актуальность избранной темы, определен объект, предмет, цель, задачи исследования, положения, выносимые на защиту, описана опытно-экспериментальная работа, проделанная автором диссертации, и даются рекомендации по использованию некоторых теоретических результатов научного исследования.
		Удовлетворительно	В докладе недостаточно изложены актуальность избранной темы, объект, предмет, цель и, задачи исследования, положения, выносимые на защиту, описана экспериментальная работа, проделанная автором диссертации, не даются рекомендации по использованию результатов научного исследования.
		Неудовлетворительно	В докладе не изложены актуальность избранной темы, определен объект, предмет, цель, задачи исследования, положения, выносимые на защиту, непоследовательно описана экспериментальная работа, не даны рекомендации по использованию результатов научного исследования.
Владеет	методами расчета термодинамических функций простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов методами определения и расчета параметров строения молекул. закономерностями адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях; законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий, навыками определения механизмы сложных химических процессов,	Отлично	Основные научные результаты диссертации опубликованы в ведущих рецензируемых научных журналах и изданиях.
		Хорошо	Основные научные результаты диссертации опубликованы в рецензируемых научных журналах и изданиях.
		Удовлетворительно	Основные научные результаты диссертации опубликованы в нерцензируемых научных журналах и изданиях.
		Неудовлетворительно	Основные научные результаты диссертации опубликованы в виде тезисов докладов конференций и не рецензируемых сборниках местного уровня.

	владеть законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий		
--	---	--	--

**Методические рекомендации по подготовке
диссертации на соискание ученой степени
кандидата наук**

Кандидатская диссертация представляет собой квалификационную работу, содержащую совокупность перспективных и актуальных в плане общетеоретической ориентации и практической значимости результатов и положений. Она служит свидетельством положительного личного опыта автора в применении научных методов и приемов, используемых в области фундаментальных и прикладных наук, в самостоятельном осмыслении практического применения знаний в педагогической деятельности.

Кандидатская диссертация является законченным научным исследованием, в котором отражается теоретический потенциал автора, его умение интерпретировать различные концепции и теории, способность к творческому осмыслению анализируемого материала, степень владения профессиональным языком в предметной области знания.

Выбор темы

При выборе темы важно учитывать общий стаж в избранной области знаний, предыдущий «задел» (публикации и рукописные работы), опыт выступлений с научными сообщениями и т. п. Целесообразно ставить перед собой задачу сравнительно узкого плана, чтобы можно было ее глубоко проработать.

Помощь в этом могут оказать следующие приемы.

1. Просмотр каталогов защищенных диссертаций.
2. Ознакомление с новейшими результатами исследований в смежных, пограничных областях науки, так как именно здесь можно найти новые и порой неожиданные решения.
3. Пересмотр известных научных решений при помощи новых методик, с новых теоретических позиций, с привлечением новых существенных факторов, выявленных непосредственно диссертантом. Выбор темы диссертации по принципу основательного пересмотра уже известных науке теоретических положений с новых позиций, под новым углом зрения, на более высоком уровне обобщения широко применяется в практике научной работы.
4. Ознакомление с аналитическими обзорами и статьями в специальной периодике; беседы и консультации со специалистами-практиками, в процессе которых можно выявить вопросы, мало изученные в науке.

Планирование работы

Планирование работы начинается с составления рабочего плана, представляющего собой наглядную своеобразную схему предпринимаемого исследования. Такой план используется на первых стадиях работы, позволяя эскизно представить исследуемую проблему в различных вариантах: это существенно облегчает оценку общей композиции и рубрикации будущей диссертации.

Первоначально рабочий план только в общих чертах дает характеристику предмета исследования, однако в дальнейшем он может и должен уточняться, однако основная задача, поставленная соискателем, должна оставаться неизменной.

Библиографический поиск литературных источников

Знакомство с опубликованной по теме диссертации литературой начинается с разработки замысла предполагаемого научного исследования, который находит свое выражение в теме и рабочем плане диссертации. Это позволяет более целенаправленно вести поиск литературных источников по избранной теме и глубже осмысливать тот материал, который содержится в опубликованных в печати работах.

Следует определить порядок поиска и в соответствии с ним составить картотеку или список литературных источников по теме. Правильно составленная картотека даже при беглом обзоре заглавий источников позволяет охватить тему в целом и уже в начале исследования уточнить цели.

Просмотру должны быть подвергнуты все виды источников, содержание которых связано с темой диссертационного исследования: материалы, опубликованные в различных отечественных и зарубежных изданиях; непубликуемые документы (отчеты о научно-исследовательских работах, диссертации, авторефераты, депонированные рукописи и т.п.); официальные материалы.

Наряду с информационными изданиями для информационного поиска следует использовать автоматизированные информационно-поисковые системы, базы и банки данных.

Композиция диссертации

Поскольку диссертация является квалификационным трудом, ее оценивают не только по теоретической научной ценности, актуальности темы и прикладному значению полученных результатов, но и по уровню общеметодической подготовки этого научного произведения, что находит отражение, прежде всего, в его композиции.

Композиция диссертации - это последовательность расположения основных частей, к которым относятся основной текст (главы и параграфы), а также части ее справочно-сопроводительного аппарата.

Традиционно сложилась определенная композиционная структура диссертационного исследования, основными элементами которой в порядке их расположения являются следующие:

1. Титульный лист
2. Оглавление
3. Введение
4. Главы основной части
5. Заключение
6. Библиографический список
7. Приложения

Титульный лист является первой страницей диссертационной работы и заполняется по строго определенным правилам.

После титульного листа помещается оглавление, в котором приводятся все заголовки диссертационной работы и указываются страницы, с которых они начинаются. Заголовки оглавления должны точно повторять заголовки в тексте. Сокращать или давать их в другой формулировке, последовательности и соподчиненности по сравнению с заголовками в тексте нельзя.

Заголовки одинаковых ступеней рубрикации необходимо располагать друг над другом. Все заголовки начинают с прописной буквы без точки на конце. Последнее слово каждого заголовка соединяют отточием с соответствующим ему номером страницы в правом столбце оглавления.

Во введении диссертации обосновывается актуальность выбранной темы; выявляются противоречие и проблема; формулируются цель, задачи, объект, предмет и гипотеза исследования; аргументируются методы исследования; определяются научная новизна, теоретическая значимость и практическая ценность результатов исследования, а также положения, выносимые на защиту.

В конце введения раскрывается структура диссертационной работы, дается перечень ее структурных элементов и обосновывается последовательность их расположения.

В главах основной части диссертационной работы подробно рассматриваются теория, методология, методика и техника исследования; обобщаются полученные результаты. В содержании основной части необходимо точно отразить понятийный аппарат исследования и полностью раскрыть тему диссертационной работы. Здесь показывается умение диссертанта кратко, ясно, логично, точно и аргументировано излагать материал.

Заключение диссертации представляет собой не простой перечень полученных результатов проведенного исследования, а их итоговый синтез, т. е. формулирование того нового, что внесено автором в изучение и решение проблемы. Это последовательное, логически стройное изложение полученных итогов и их соотношение с целью и задачами, гипотезой, научной новизной, теоретической значимостью, практической ценностью и положениями, выносимыми на защиту, поставленными и сформулированными во введении. В заключении содержится так называемое «выводное» знание, которое является новым по отношению к исходному знанию. Именно оно выносится на обсуждение и оценку в процессе публичной защиты диссертации.

Заключение не должно подменяться механическим суммированием выводов по главам, а должно содержать то новое, существенное, что составляет итоговые результаты исследования. Предполагается также наличие обобщенной итоговой оценки проделанной работы. При этом важно указать, в чем заключается ее главный смысл, какие важные побочные научные результаты получены, какие новые научные задачи появляются в связи с проведением диссертационного исследования.

Библиографический список составляет одну из существенных частей диссертации и отражает самостоятельную творческую работу диссертанта.

Материалы, не являющиеся насущно важными для понимания решения научной задачи, выносятся в приложения. Приложение - это часть основного текста, которая имеет дополнительное (обычно справочное) значение, но является необходимой для более полного освещения темы.

Понятийный аппарат диссертации

Актуальность - обязательное требование к любой диссертации. Поэтому введение должно начинаться с обоснования актуальности выбранной темы. Освещение актуальности должно быть немногословным. Достаточно в пределах одной-двух страниц машинописного текста показать суть проблемной ситуации (затруднения или противоречия).

Определение проблемы исследования - достаточно сложная задача. Любое научное исследование проводится для того, чтобы преодолеть определенные трудности в процессе познания новых явлений, объяснить ранее неизвестные факты или выявить неполноту старых способов объяснения известных фактов. В научном исследовании сущность проблемы составляет противоречие между фактами и их теоретическим осмыслением. В диссертации проблема, как правило, также выражает основное противоречие, которое будет разрешаться автором в ходе исследования.

Правильная постановка и ясная формулировка проблемы очень важна, ибо она в очень большой степени определяет стратегию исследования вообще и направление научного поиска в особенности.

Объект и предмет исследования как категория научного процесса соотносятся между собой как общее и частное. В объекте выделяется та его часть, которая служит предметом исследования. Именно на него и направлено основное внимание диссертанта, именно предмет исследования определяет тему диссертационной работы, которая обозначается на титульном листе как ее заглавие. Таким образом, объект - это процесс или явление, порождающие проблемную ситуацию; предмет - это то, что находится в границах объекта.

Понятие «предмет» исследования значительно уже и конкретнее объекта. В предмет включаются только те элементы, связи, отношения внутри объекта, которые непосредственно будут изучаться в диссертации. Один и тот же объект может изучаться с разных позиций, что и определяет предмет исследования.

Следующий элемент, который необходимо сформулировать, - цель исследования. Существенная особенность цели как элемента методологического аппарата состоит в том, что она объединяет и концентрированно выражает основной смысл проблемы и предмета исследования в их взаимосвязи. Иначе говоря, цель выражает путь решения проблемы и те конечные результаты, которые при этом должны быть получены.

В соответствии с предметом и целью определяются задачи исследования. Задачи - это последовательные шаги, которые обеспечивают достижение поставленной цели и конкретизируют ее. Задачи должны быть взаимосвязаны и отражать общий путь достижения цели.

Формулировку задач необходимо делать как можно более тщательно, поскольку описание их решения должно составить содержание глав диссертационной работы. Это важно также и потому, что заголовки таких глав рождаются именно из формулировок задач предпринимаемого исследования.

Обязательным элементом введения диссертации является также указание на методы и методологические основы исследования

Метод-это своеобразный инструмент научного исследования, позволяющий изучить предмет глубоко и всесторонне, проникнуть в суть решаемого противоречия. Он является своеобразным связующим звеном между теорией и практикой, т.е. между поставленными задачами и процессом их решения. Успех исследования находится в прямой зависимости от методов: результаты тем достовернее, чем богаче арсенал используемых методов. Методы должны согласовываться с изучаемым явлением, соответствовать ему.

Все многообразие методов можно разделить на две группы: теоретические и эмпирические методы. Теоретические методы раскрывают сущность изучаемых явлений, выявляют закономерные связи и отношения. Они используются при определении проблемы и формулировании гипотезы исследования (анализ, синтез, абстрагирование, идеализация, дедукция, индукция и др.). Эмпирические методы служат средством сбора конкретных фактов, направлены на их выявление фактов и описание явлений (наблюдение, беседа, интервью, анкетирование; изучение репродуктивных и творческих работ учащихся; изучение педагогической документации; педагогический эксперимент).

Научная новизна исследования - это признак, наличие которого дает право на использование понятия «впервые» при характеристике полученных результатов и проведенного исследования в целом.

Понятие «впервые» означает в науке факт отсутствия подобных результатов. Впервые может проводиться исследование на оригинальные темы, которые ранее не исследовались в той или иной отрасли научного знания.

Для большого количества наук научная новизна проявляется в наличии теоретических положений, которые впервые сформулированы и содержательно обоснованы; методических

рекомендаций, которые внедрены в практику и оказывают существенное влияние на достижение новых социально-экономических результатов.

В большинстве кандидатских диссертаций бывает достаточно сложно выделить отдельным разделом теоретическую значимость исследования. Однако в соответствии с современными требованиями это необходимо делать обязательно. Чаще всего теоретическая значимость исследований по теории и методике обучения и воспитания связана с теоретическим обоснованием каких-либо новых подходов к обучению и воспитанию, разработкой критериев деятельности в условиях реализации этих подходов, представлением прогностических и учебных моделей организации учебно-воспитательного процесса и т.п.

Оценивая практическую значимость исследования, следует знать, что она зависит от того, какой характер имеет каждая конкретная работа.

Достоверность результатов исследования обеспечивается разнообразием научных источников; большим объемом исследуемого материала; использованием адекватных материалу современных методов и приемов исследования.

Положения, выносимые на защиту, непосредственно обусловлены целью, предметом, гипотезой, задачами и научной новизной исследования. Эта обусловленность должна красной нитью пройти через все содержание диссертации и найти в ней полное и аргументированное подтверждение.

К формулировке положений необходимо подходить особо тщательно, ибо именно они являются определяющей содержательной основой диссертации. Здесь аккумулируются ведущие авторские идеи: находят отражение предмет, научная новизна и гипотеза исследования.

В кандидатских диссертациях целесообразно ограничить положения двумя, максимум тремя пунктами, требующими доказательства.

Апробация и внедрение результатов исследования - указывается, где и какой форме проводилась апробация и внедрение её результатов диссертационной работы, что подтверждается при защите представлением соответствующих справок о внедрении.