

**БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
ХАНТЫ-МАНСИЙСКОГО АВТОНОМНОГО ОКРУГА – ЮГРЫ
«Сургутский государственный университет»**

УТВЕРЖДАЮ:
Проректор по учебно-
методической работе

Е.В. Коновалова

2021 г.



**ПРОГРАММА
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, 2021 г.

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями:


1) Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению 04.06.01 Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации), утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 30.07.2014 г. № 869;

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

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

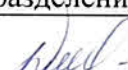
Автор программы:

д-р техн. наук., профессор



В.П. Нехорошев

Согласование рабочей программы:

Подразделение (кафедра / библиотека)	Дата согласования	Ф.И.О., подпись нач. подразделения
Отдел комплектования и научной обработки документов	15.05.2021	Дмитриева И.И. 

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии
« 16 » марта 2021 года, протокол № 8

И. о. зав. кафедрой,
канд. хим. наук, доцент



Л.В. Цыро

Программа рассмотрена и одобрена на заседании Ученого совета института естественных и
технических наук

« 6 » апрель 2021 года, протокол № 3

Председатель УС института,
директор ИЕТН, канд. хим. наук, доцент



Ю.Ю. Петрова

1. 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.

2. 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).

3. 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:

универсальные:

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		
Знания	Умения	Навыки (опыт деятельности)
методов критического анализа и оценки современных научных достижений, методов генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач	критически анализировать полученную информацию и представлять результаты собственных научных исследований	обоснованного выбора экспериментальных методов и средств решения сформулированных задач по направленности Физическая химия
УК-2 – способностью проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки		
Знания	Умения	Навыки (опыт деятельности)
классических и современных методов решения задач по тематике научных исследований	определять перспективы дальнейшей работы	методологией исследования химической активности

УК-3 – готовностью участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач		
Знания	Умения	Навыки (опыт деятельности)
принципы построения научного исследования в выбранной области химических наук	планировать научно-исследовательскую работу в области физической химии	методами перспективного планирования, подготовки и проведения НИР, обработки результатов экспериментальных исследований в области физической химии
УК-4 – готовностью использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках		
Знания	Умения	Навыки (опыт деятельности)
основные источники научной информации и требования к представлению информационных материалов	разрабатывать эффективные схемы выделения и очистки органических соединений	навыками получения, первичной обработки и анализа научных данных
УК-5 – способностью планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития		
Знания	Умения	Навыки (опыт деятельности)
методы достижения поставленной цели при выполнении научного исследования	обосновать новизну и значимость собственного исследования	систематическими и углубленными знаниями по выбранной направленности подготовки; навыками профессионального мышления

общепрофессиональные:

ОПК-1 – способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологии		
Знания	Умения	Навыки (опыт деятельности)
достижения структурного анализа, изучения свойств и создания модельных систем для исследования химических процессов	самостоятельно получать экспериментальные данные по выбранной тематике исследования	современными методами математической и статистической обработки химических данных
ОПК-2 – готовностью организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук;		
Знания	Умения	Навыки (опыт деятельности)
основные достижения и тенденции развития органической химии	в рамках поставленной задачи самостоятельно планировать экспериментальную работу	логикой научного исследования; методами поиска научной информации
ОПК-3 – готовностью к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования;		
Знания	Умения	Навыки (опыт деятельности)
основные современные направления в области органической химии, ее роль в развитии общества	анализировать собранный эмпирический материал и делать достоверные выводы	профессиональной терминологией при презентации проведенного исследования

профессиональные:

ПК-1 – способностью владеть методологией теоретических и экспериментальных исследований, адаптировать и обобщать их результаты по направленности ОПОП при преподавании дисциплин в вузе		
Знания	Умения	Навыки (опыт деятельности)
важнейшие методы исследования свойств веществ и процессов	оформлять и представлять результаты научных исследований	навыками публичных выступлений и ведения научной дискуссии
ПК-2 – способностью экспериментально определять термодинамические свойства веществ, рассчитать термодинамические функции простых и сложных систем, термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов		
Знания	Умения	Навыки (опыт деятельности)
знать основные термодинамические методики расчета функций	самостоятельно получать экспериментальные данные по свойствам веществ	владеть современными методами математической и статистической обработки экспериментальных данных
ПК-3 - способностью определять и рассчитать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ, связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями		
Знания	Умения	Навыки (опыт деятельности)
знать квантово-химические методы расчета параметров строения молекул	анализировать собранный эмпирический материал и делать достоверные выводы о связи реакционной способности веществ с их строением	навыками систематических и углубленных знаний связи реакционной способности веществ с условиями реакции
ПК-4 – способностью определять термодинамические характеристики процессов на поверхности, владеть закономерностями адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях		
Знания	Умения	Навыки (опыт деятельности)
знать классические и современные методы решения задач по определению термодинамических характеристик процессов	уметь интерпретировать результаты эксперимента на основе современных научных знаний, делать заключение на основе полученных экспериментальных данных	владеть современными приемами проведения эксперимента по определению термодинамических характеристик процессов
ПК-5 - способностью определять механизмы сложных химических процессов, владеть законами физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации, теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий		
Знания	Умения	Навыки (опыт деятельности)
обладать систематическими и углубленными знаниями о механизмах сложных химических процессов	анализировать собранный эмпирический материал и делать достоверные выводы	самостоятельно получать экспериментальные данные

4. ПРОГРАММА ГОСУДАРСТВЕННОГО ЭКЗАМЕНА

4.1 Форма проведения государственного экзамена

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

Перечень вопросов для государственного экзамена может быть связан как с образовательной программой в целом, с ее направленностью или с темой научного исследования аспиранта, а так и с основами педагогической деятельности.

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 аспирантом 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.

При проведении государственной итоговой аттестации реализация основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлениям подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре сопровождается применением дистанционных образовательных технологий.

4.3 Содержание государственного экзамена

I. Строение вещества

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

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 Шрёдингера 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.

Электронная корреляция в атомах и молекулах. Её проявления в свойствах молекул. Метод конфигурационного взаимодействия.

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.

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, σ - и π -орбитали. π -Электронное приближение.

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

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.

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

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.

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 усреднённая 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 (нематерики, смектики, холестерики и др.).

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

II. Химическая термодинамика

Основные понятия и законы термодинамики

1. Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, интенсивные и экстенсивные переменные. Уравнения состояния. Теорема о соответственных состояниях. Вириальные уравнения состояния.

2. *Первый закон термодинамики.* Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия, теплоемкость. Закон Гесса. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгоффа. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах.

3. *Второй закон термодинамики.* Энтропия и её изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно – Клаузиуса. Различные шкалы температур.

Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца. Уравнения Максвелла. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов.

Уравнение Гиббса – Гельмгольца. Работа и теплота химического процесса. Химические потенциалы.

4. *Химическое равновесие.* Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций. Приведенная энергия Гиббса и её использование для расчетов химических равновесий. Равновесие в поле внешних сил. Полные потенциалы.

Элементы статистической термодинамики

5. Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые Г- и μ -пространства. Эргодическая гипотеза. Термодинамическая вероятность и её 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.,

Приближение «жесткий ротатор – гармонический осциллятор». 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.

Элементы термодинамики необратимых процессов

6. 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 Онсагера. Стационарное состояние системы и теорема Пригожина.

Термодиффузия и её описание в неравновесной термодинамике. Уравнение Чепмена – Энскога.

Растворы. Фазовые равновесия

7. *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.

8. *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.

Адсорбция и поверхностные явления

9. *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 Ленгмюра. Адсорбция из растворов. Уравнение Брунауэра – Эмета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента.

Хроматография, различные её типы (газовая, жидкостная, противоточная и др.).

10. *Поверхность раздела фаз.* Свободная поверхностная энергия, поверхностное натяжение, избыточные термодинамические функции поверхностного слоя. Изменение поверхностного натяжения на границе жидкость – пар в зависимости от температуры. Связь свободной поверхностной энергии с теплотой сублимации (правило Стефана), модулем упругости и другими свойствами вещества.

Эффект Ребиндера: изменение прочности и пластичности твердых тел вследствие снижения их поверхностной энергии.

Капиллярные явления. Зависимость давления пара от кривизны поверхности жидкости. Капиллярная конденсация. Зависимость растворимости от кривизны поверхности растворяющихся частиц (закон Гиббса – Оствальда – Фрейндлиха).

Электрохимические процессы

11. 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, её 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.

III. Кинетика химических реакций

Химическая кинетика

1. *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.

2. *Феноменологическая кинетика* сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций. Квазистационарное приближение. Метод Боденштейна – Тёмкина. 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.

3. *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).

4. Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы её определения.

5. *Элементарные акты химических реакций* и физический смысл энергии активации. Термический и нетермический 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.

6. *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 радиационнохимические реакции. Элементарные фотохимические процессы. Эксимеры и эксиплексы. Изменение физических и химических свойств молекул при электронном возбуждении. Квантовый выход. Закон Эйнштейна – Штарка.

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

Электрокаплярные явления, уравнение Липпмана.

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

Химические источники тока, их виды. Электрохимическая коррозия. Методы защиты от коррозии.

Катализ

8. *Классификация каталитических реакций* и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия.

9. *Гомогенный катализ*. Кислотно-основной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гаммета. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Брэнстеда. 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.

10. *Ферментативный катализ*. Адсорбционные и каталитические центры ферментов. Активность и субстратная селективность ферментов. Коферменты. Механизмы ферментативного катализа.

11. *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.

4.4 Перечень экзаменационных вопросов

1. Электронное строение атомов и молекул. Одноэлектронное приближение. Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Правило Хунда. Электронная плотность. Теорема Купманса. Пределы применимости одноэлектронного приближения.

2. 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, σ - и π -орбитали. π -Электронное приближение.

3. 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.

4. Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, интенсивные и экстенсивные переменные. Уравнения состояния.

5. Первый закон термодинамики. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия, теплоемкость. Закон Гесса. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры.

6. Второй закон термодинамики. Энтропия. Изменение энтропии в обратимых и необратимых процессах.

7. Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца. Уравнения Максвелла. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов.

8. Уравнение Гиббса – Гельмгольца. Работа и теплота химического процесса. Химические потенциалы.

9. Химическое равновесие. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции. Расчеты констант равновесия химических реакций.

10. Растворы Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля. Неидеальные растворы и их свойства. Коэффициенты активности и их определение.

11. Коллигативные свойства растворов. Парциальные молярные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса – Дюгема.
12. Термодинамическая классификация растворов. Функции смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства.
13. Гетерогенные системы. Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса. Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды, серы, фосфора и углерода. Уравнение Клапейрона – Клаузиуса.
14. Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Равновесие жидкость – пар в двухкомпонентных системах. Законы Гиббса – Коновалова. Азеотропные смеси.
15. Адсорбция. Виды адсорбции. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Уравнение Фрейндлиха, уравнение Ленгмюра. Уравнение Брунауэра – Эммета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента.
16. Растворы электролитов. Коэффициенты активности в растворах электролитов. Средняя активность и средний коэффициент активности, их связь с активностью отдельных ионов. Основные положения теории Дебая – Хюккеля.
17. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты.
18. Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и в электрохимической цепи. Возникновение потенциала на границе раздела фаз. Термодинамика гальванического элемента. Электродвижущая сила, её 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.
19. Основные понятия химической кинетики. Простые и сложные реакции, молекулярность, скорость простой реакции, порядок реакции. Основной постулат химической кинетики. Способы определения скорости реакции, константа скорости и порядка реакции.
20. Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы её определения. Энергия активации. Уравнение Аррениуса. Методы определения энергии активации.
21. Кинетика сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций.
22. Приближенные методы решения кинетических уравнений. Квазистационарное приближение. Метод Боденштейна – Тёмкина.
23. Цепные реакции. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций. Предельные явления в разветвленных цепных реакциях: полуостров воспламенения, период индукции. Тепловой взрыв.
24. Реакции в потоке. Реакции идеального вытеснения и идеального смешения. Колебательные реакции.
25. Теория активных столкновений. Сечение химических реакций. Формула Траутца – Льюиса. Расчет предэкспоненциального множителя по молекулярным постоянным. Стерический фактор.
26. Теория переходного состояния (активированного комплекса). Поверхность потенциальной энергии. Путь и координата реакции. Статистический расчет константы скорости.
27. Мономолекулярные реакции в газах, схема Линдемана – Христиансена. Теория РРКМ. Бимолекулярные и тримолекулярные реакции, зависимость предэкспоненциального множителя от температуры.
28. Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц. Клеточный эффект и сольватация.
29. Кинетика гетерогенных каталитических реакций. Различные режимы протекания реакций (кинетическая и внешняя кинетическая области, области внешней и внутренней диффузии).

30. Фотохимические реакции. Элементарные фотохимические процессы. Эксимеры и эксиплексы. Квантовый выход. Закон Эйнштейна – Штарка.

31. Электрохимические реакции. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Теория Гуи – Чапмена – Грэма. Электрокапиллярные явления, уравнение Липпмана. Электрокинетические свойства коллоидных систем. Электрофорез и электроосмос. Электрокинетический потенциал.

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

33. Химические источники тока, их виды. Электрохимическая коррозия. Методы защиты от коррозии.

34. Гомогенный и гетерогенный катализ. Принцип действия катализаторов. Классификация каталитических реакций. Основные промышленные каталитические процессы.

35. Кислотно-основной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гаммета. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Брэнстеда. Корреляционные уравнения для энергий активации и теплот реакций. Специфический и общий основной катализ.

36. Ферментативный катализ и его особенности. Механизмы ферментативного катализа. Ингибирование ферментативных реакций.

4.5 Оценочные средства государственного экзамена (Приложение к программе государственной итоговой аттестации: Оценочные средства).

4.6 Учебно-методическое и информационное обеспечение подготовки к государственному экзамену

4.6.1. Основная литература

1. Течиева, В. З. Организация исследовательской деятельности с использованием современных научных методов [Электронный ресурс] : Учебно-методическое пособие / В. З. Течиева, З. К. Малиева. Владикавказ: Северо-Осетинский государственный педагогический институт, 2016. 152 с. ISBN 978-5-98935-187-9. Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/73811.html> . – ЭБС «IPRbooks».
2. Салем, Р.Р. Физическая химия. Термодинамика : учебное пособие / Салем Р.Р. Москва : Физматлит, 2004. 352 с. URL: <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5922100785.html> .
3. Эткинс, П. Физическая химия [Текст] / П. Эткинс, Дж. де Паула : в 3 ч. = Atkin's Physical Chemistry : [учебные пособия]. 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., 2007 : Мир. 494 с. : ил. ISBN 5-03-003786-1 : 0,00.
4. Однокомпонентные системы. Фазовые равновесия и методы исследования [Электронный ресурс] : Учебное пособие / И. К. Гаркушин [и др.]. Самара : Самарский государственный технический университет, ЭБС АСВ, 2017. 140 с. ISBN 978-5-7964-2021-8. Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/90661.html>
5. Булидорова, Г. В. Кинетика сложных реакций [Электронный ресурс] : Учебное пособие / Г. В. Булидорова, К. А. Романова, Ю. Г. Галяметдинов. Кинетика сложных реакций, 2022-01-18. Казань : Казанский национальный исследовательский технологический университет, 2016. 88 с. ISBN 978-5-7882-1919-6. Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/62180.html>
6. Булидорова, Г. В. Кинетика гетерогенных и каталитических реакций [Электронный ресурс] : Учебное пособие / Г. В. Булидорова, К. А. Романова, Ю. Г. Галяметдинов. Кинетика гетерогенных и каталитических реакций, 2022-01-18. Казань : Казанский национальный исследовательский технологический университет, 2017. 111 с. ISBN 978-5-7882-2240-0. Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/62180.html>
7. Электродные процессы. Электродвижущие силы [Электронный ресурс] : Учебное пособие / Г. В. Булидорова [и др.]. Электродные процессы. Электродвижущие силы, 2022-01-18. Казань :

Казанский национальный исследовательский технологический университет, 2017. 104 с. ISBN 978-5-7882-2168-7. Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/79601.html>

4.6.2. Дополнительная литература

1. Организация и ведение научных исследований аспирантами [Электронный ресурс] : Учебник / Е. Г. Анисимов [и др.]. Москва : Российская таможенная академия, 2014. 278 с. ISBN 978-5-9590-0827-7. Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/69989.html>. — ЭБС «IPRbooks».

2. Синченко, Георгий Чонгарович. Логика диссертации : Учебное пособие / Омская академия Министерства внутренних дел Российской Федерации. 4, перераб. и доп. Москва : Издательство "ФОРУМ", 2015. 312 с. URL: <http://znanium.com/catalog/document?id=225143>

3. Смагунова, А. Н. Математическое планирование эксперимента в методических исследованиях аналитической химии [Электронный ресурс] : учебное пособие / Смагунова А. Н., Пашкова Г. В., Белых Л. И. 3-е изд., стер. Санкт-Петербург : Лань, 2018. 120 с. URL: <https://e.lanbook.com/book/98248> .

4. Свиридов, В. В. Физическая химия [Электронный ресурс] / Свиридов В. В., Свиридов А. В. Санкт-Петербург : Лань, 2016. 600 с. Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=87726 . ISBN 978-5-8114-2262-3.

5. Мельников, М.Я. Практическая химическая кинетика. Химическая кинетика в задачах с решениями : учебное пособие / Мельников М.Я. Москва : МГУ, 2006. 592 с. Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5211052331.html> . ISBN 5-211-05233-1.

4.6.2.1. Электронно-библиотечные системы:

1. Электронно-библиотечная система Znanium. (Базовая коллекция). www.znanium.com - Правообладатель: ООО «Знаниум».

2. Электронно-библиотечная система издательства «Лань». <http://e.lanbook.com/>
Правообладатель: ООО «ЭБС Лань».

3. Электронно-библиотечная система IPRbooks (Базовая коллекция). <http://iprbookshop.ru>
Правообладатель: ООО «Ай Пи Эр Медиа».

4. Консультант студента. «Электронная библиотека технического ВУЗа»<http://www.studentlibrary.ru>
Правообладатель: ООО «Политехресурс».

5. Электронная библиотечная система «Юрайт» <https://biblio-online.ru/>
Правообладатель: ООО «Электронное издательство ЮРАЙТ».

4.6.3. Лицензионное программное обеспечение

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

4.6.4. Современные профессиональные базы данных

1. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU (<http://www.elibrary.ru>)
Правообладатель: ООО «Научная электронная библиотека».

2. Национальная электронная библиотека (НЭБ) (нэб.рф)
Правообладатель: Федеральное государственное бюджетное учреждение «Российская государственная библиотека».

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

4.6.5. Международные реферативные базы данных научных изданий

1. Web of Science Core Collection <http://webofknowledge.com> (WoS)
Правообладатель: НП «НЭИКОН»
2. «Scopus» <http://www.scopus.com>

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

4.6.6. Информационные справочные системы

Гарант

Правообладатель: ООО "Гарант - ПроНет". Договор №1/ГС-2011-53-05-11/с доступ предоставлен бессрочно.

КонсультантПлюс

Правообладатель: ООО "Информационное агентство "Информбюро". Договор об информационной поддержке РДД-10/2019/д18/44 от 18.11.2018 г., доступ предоставлен с 1.01.2019 г. до 31.12.2024 г.

4.6.7. Интернет-ресурсы

1. Грамота.ру (<http://www.gramota.ru/>)
2. Единое окно доступа к образовательным ресурсам - информационная система(<http://window.edu.ru/>)
3. Министерство науки и высшего образования РФ [Электронный ресурс]. – Режим доступа : <https://minobrnauki.gov.ru/>
4. Научная педагогическая электронная библиотека (НПЭБ) (<http://elib.gnpbu.ru>)
5. Портал Федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.fgosvo.ru>
6. Официальный сайт Министерства промышленности и торговли Российской Федерации. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://minpromtorg.gov.ru/>
7. Официальный сайт Министерства науки и высшего образования Российской Федерации. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://minobrnauki.gov.ru/>
8. Официальный сайт Высшей аттестационной комиссии при Министерстве науки и высшего образования Российской Федерации. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://vak.ed.gov.ru/>
9. Официальный сайт российского фонда фундаментальных исследований. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.rfbr.ru/rffi/ru/>
10. Российская национальная библиотека (http://primo.nl.ru/primo_library/libweb/action/search.do?menuitem=2&catalog=true)
11. Российский общеобразовательный портал [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.school.edu.ru>
12. Федеральная служба по надзору в сфере образования и науки [Электронный ресурс]. – Режим доступа : <http://www.obrnadzor.gov.ru/ru/>
13. Федеральный портал «Российское образование» [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.edu.ru>
14. Федеральный справочник «Образование в России» [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://federalbook.ru/projects/fso/fso.html>

4.6.8. Методические материалы

1. Государственная итоговая аттестация по программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре [Электронный ресурс] : методические указания для аспирантов СурГУ / Департамент образования и молодежной политики Ханты-Мансийского автономного округа - Югры, БУ ВО Ханты-Мансийского автономного округа - Югры "Сургутский государственный университет" ; [сост. Е. В. Воронина] .— Электронные текстовые данные (1 файл: 916 912 байт) .— Сургут : Сургутский государственный университет, 2019 .— Заглавие с титульного экрана .— Коллекция: Учебно-методические пособия СурГУ .— Режим доступа: Корпоративная сеть СурГУ или с любой точки подключения к Интернет, по логину или паролю .— Системные требования: Adobe Acrobat Reader .— <URL:<https://elib.surgu.ru/fulltext/umm/5981>>.

4.7. Материально-техническое обеспечение государственного экзамена

Лекционная аудитория 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)

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 Примерный перечень тем научной квалификационной работы (диссертации)

1. Физико-химические особенности формирования асфальтенов.
2. Закономерности превращения дифенилсульфида и дифениламина на хлористом алюминии.
3. Физико-химические свойства модифицированных сорбентов на основе бентонита.
4. Физико-химические свойства дорожных битумов, модифицированных атактическим полипропиленом.
5. Физикохимия новых химических маркеров.
6. Пиромеллитовые индикаторы на основе пиромеллитового диангидрида и их физико-химические свойства.
7. Термостойкие эмульгаторы для буровых растворов на углеводородной основе.
8. Физико-химические закономерности ацилирования о-крезола пиромеллитовым диангидридом.
9. Физико-химические закономерности ацилирования резорцина пиромеллитовым диангидридом.
10. Термоокислительная деструкция отходов полиэтилена.

5.3 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 НКР 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 НКР включает в себя:

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

Автор НКР 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.

Рекомендуемая общая продолжительность защиты научного доклада – 45 минут.

Оценка защиты научного доклада 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.

5.4 Порядок рецензирования и получения отзыва на научно-квалификационную работу

НКР по ОПОП ВО – программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре подлежат обязательному рецензированию с целью оценки соответствия критериям, установленным Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. №842 «О порядке присуждения ученых степеней», а также вывод о допуске аспиранта к ГИА в форме научного доклада об основных результатах подготовленной НКР.

Рецензированию подлежат полностью завершённые, подписанные всеми заинтересованными сторонами НКР. Изменения после рецензирования не вносятся.

Для рецензирования НКР назначаются два рецензента, в качестве которых могут привлекаться профессора и преподаватели СурГУ, специалисты производства, научных учреждений и преподаватели иных образовательных организаций высшего образования, являющиеся экспертами из числа компетентных в соответствующей отрасли науки ученых, имеющие публикации в соответствующей сфере исследования.

Основные требования для назначения рецензента:

– наличие у предполагаемого эксперта ученой степени, либо наличие ученой степени, полученной в иностранном государстве, признаваемой в Российской Федерации, обладателю которой предоставлены те же академические и (или) профессиональные права, что и доктору или кандидату наук в Российской Федерации.

– наличие публикаций в соответствующей сфере исследования.

Рецензент назначается заведующим выпускающей кафедрой и утверждается протоколом заседания кафедры.

Аспирант предоставляет НКР рецензенту не позднее, чем за 20 календарных дней до защиты научного доклада об основных результатах подготовленной НКР и возвращает на выпускающую кафедру вместе с официальной письменной рецензией не позднее, чем за 7 дней до защиты НКР.

Рецензия оформляется по форме, представленной в Приложении 1, подписывается рецензентом с указанием его должности, места работы, ученой степени и (или) ученого звания (при наличии). Рецензент заверяет личную подпись на рецензии в отделе кадров в установленном порядке.

В рецензии на НКР должны быть освещены следующие вопросы:

- актуальность избранной темы;
- степень обоснованности сформулированных научных положений, выводов и рекомендаций;
- достоверность и новизна исследования, сформулированных полученных результатов, выводов и рекомендаций;
- значимость для науки и практики полученных автором результатов;
- конкретные рекомендации по использованию результатов и выводов НКР;
- оценка содержания НКР, ее завершенности;
- недостатки в содержании и оформлении НКР;
- соответствие НКР критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней.

В заключительной части рецензии следует сделать вывод о допуске (не допуске) аспиранта к ГИА в форме научного доклада об основных результатах подготовленной НКР, оформленной в соответствии с требованиями, устанавливаемыми Министерством образования и науки Российской Федерации (пункт 15 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842 «О порядке присуждения ученых степеней»).

Отрицательная рецензия не является препятствием для защиты научного доклада об основных результатах подготовленной НКР. В случае отрицательного отзыва участие рецензента в заседании государственной экзаменационной комиссии обязательно.

Если рецензент присутствует на защите научного доклада об основных результатах подготовленной НКР, он выступает с отзывом лично. При отсутствии рецензента отзыв зачитывается секретарем ГЭК. Автору НКР предоставляется право ответа на замечания рецензента.

Аспирант предоставляет НКР научному руководителю не позднее, чем за 20 календарных дней до защиты научного доклада об основных результатах подготовленной НКР и возвращает на выпускающую кафедру вместе с отзывом не позднее, чем за 7 дней до защиты НКР.

В отзыве на НКР должны быть освещены следующие вопросы:

- актуальность избранной темы;
 - степень обоснованности сформулированных научных положений, выводов и рекомендаций;
 - достоверность и новизна исследования, сформулированных полученных результатов, выводов и рекомендаций;
 - значимость для науки и практики полученных автором результатов;
 - конкретные рекомендации по использованию результатов и выводов НКР;
 - оценка содержания НКР, ее завершенности;
 - недостатки в содержании и оформлении НКР;
 - соответствие НКР критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней;
 - общая оценка работы аспиранта в период подготовки НКР.
- Форма отзыва научного руководителя приведена в Приложении 2.

Аспирант должен быть ознакомлен с рецензиями, отзывом научного руководителя на выполненную НКР в срок не позднее, чем за 7 дней до защиты научного доклада об основных результатах подготовленной НКР.

5.5 Оценочные средства представления научного доклада (Приложение к программе государственной итоговой аттестации: Оценочные средства)

5.6 Учебно-методическое и информационное обеспечение представления научного доклада об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации)

5.6.1. Основная литература

1. Организация и ведение научных исследований аспирантами : учебник / Е. Г. Анисимов, А. С. Грушко, Н. П. Багмет [и др.]. — Москва : Российская таможенная академия, 2014. — 278 с. — ISBN 978-5-9590-0827-7. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. — URL: <http://www.iprbookshop.ru/69989.html> (дата обращения: 18.03.2021). — Режим доступа: для авторизир. Пользователей

2. Райзберг, Борис Абрамович. Диссертация и ученая степень : Новые положения о защите и диссертационных советах с авторскими комментариями (пособие для соискателей) Научно-практическое пособие : Практическое пособие / Всероссийская академия внешней торговли Министерства экономического развития Российской Федерации ; Московская Школа Экономики. 11, перераб. и доп. Москва : ООО "Научно-издательский центр ИНФРА-М", 2020. 253 с. URL: <http://znanium.com/catalog/document?id=358178>.

3. Синченко, Георгий Чонгарович. Логика диссертации : Учебное пособие / Омская академия Министерства внутренних дел Российской Федерации. 4, перераб. и доп. Москва : Издательство "ФОРУМ", 2015. 312 с. URL: <http://znanium.com/catalog/document?id=225143>

4. Пентин, Юрий Андреевич. Физические методы исследования в химии : Учебник для студентов высших учебных заведений / Ю. А. Пентин, Л. В. Вилков. М., 2003 : Мир : АСТ. 683 с. : ил. (Методы в химии) . ISBN 5-03-003470-6 : 350,00. ISBN 5-17-018760-2.

5.6.2. Дополнительная литература

1. Кузнецов, Игорь Николаевич. Диссертационные работы: методика подготовки и оформления : Учебно-методическая литература / Белорусский государственный университет. 4. Москва : Издательско-торговая корпорация "Дашков и К", 2014. 488 с. URL: <http://znanium.com/catalog/document?id=358400> .

2. Резник, С. Д. Как защитить свою диссертацию: Практическое пособие : Аспирантура / Пензенский государственный университет архитектуры и строительства. 5, перераб. и доп. Москва : ООО "Научно-издательский центр ИНФРА-М", 2020. 318 с. URL: <http://znanium.com/catalog/document?id=349454> . ISBN 9785160111056.

3. Резник, Семен Давыдович. Аспирант вуза: технологии научного творчества и педагогической деятельности : Учебник / Пензенский государственный университет архитектуры и строительства. 7, изм. и доп. Москва : ООО "Научно-издательский центр ИНФРА-М", 2021. 400 с. URL: <http://znanium.com/catalog/document?id=366343> .

4. Вершинин, В. И. Планирование и математическая обработка результатов химического эксперимента [Электронный ресурс] : учебное пособие / Вершинин В. И., Перцев Н. В. 4-е изд., стер. Санкт-Петербург : Лань, 2019. 236 с. URL: <https://e.lanbook.com/book/115525> .

5.6.2.1. Электронно-библиотечные системы:

1. Электронно-библиотечная система Znanium. (Базовая коллекция). www.znanium.com - Правообладатель: ООО «Знаниум».

2. Электронно-библиотечная система издательства «Лань». <http://e.lanbook.com/> Правообладатель: ООО «ЭБС Лань».

Договор №01-1-7ГК609 от 28.11.2017 г., доступ предоставлен с 1.01.2018 г. до 31.12.2019 г.
Договор №01-19-ГК-172 от 06.08.2019 г., доступ предоставлен с 1.01.2020 г. до 31.12.2020 г.

3. Электронно-библиотечная система IPRbooks (Базовая коллекция). <http://iprbookshop.ru>

Правообладатель: ООО «Ай Пи Эр Медиа».

4. Консультант студента. «Консультант студента для медицинского вуза»
<http://www.studmedlib.ru>

Правообладатель: ООО «Институт проблем управления здравоохранением» (ИПУЗ)»

5. Консультант студента. «Электронная библиотека технического ВУЗа»
<http://www.studentlibrary.ru>

Правообладатель: ООО «Политехресурс».

6. Электронная библиотечная система «Юрайт» <https://biblio-online.ru/>

Правообладатель: ООО «Электронное издательство ЮРАЙТ».

5.6.3. Лицензионное программное обеспечение

- a) Matlab
- b) MathCAD
- c) OpenFOAM
- d) Microsoft Office

5.6.4. Современные профессиональные базы данных

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

Правообладатель: ООО «Научная электронная библиотека».

2. Евразийская патентная информационная система (ЕАПАТИС) (<http://www.eapatris.com>)

Правообладатель: ФС по интеллектуальной собственности ФГБУ "ФИПС".

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

3. Национальная электронная библиотека (НЭБ) (нэб.рф)

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

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

5.6.5. Международные реферативные базы данных научных изданий

1. Web of Science Core Collection <http://webofknowledge.com> (WoS)

Правообладатель: НП «НЭИКОН»

2. «Scopus» <http://www.scopus.com>

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

3. Архив научных журналов (NEICON) <http://archive.neicon.ru>

Правообладатель: НП "НЭИКОН". Письмо Исх. № 2014-01/29.

4. Электронные книги Springer Nature <https://link.springer.com/>

Правообладатель: ФГБУГПНТБ России/ компания Springer Customer Service Center GmbH

Лицензионный договор № 41/ЕП-2017, доступ бессрочный

5. Springer Journals – полнотекстовая коллекция электронных журналов издательства.

5.6.6. Информационные справочные системы

Гарант

Правообладатель: ООО "Гарант - ПРОНет". Договор №1/ГС-2011-53-05-11/с доступ предоставлен бессрочно.

КонсультантПлюс

Правообладатель: ООО "Информационное агентство "Информбюро". Договор об информационной поддержке РДД-10/2019/д18/44 от 18.11.2018 г., доступ предоставлен с 1.01.2019 г. до 31.12.2024 г.

5.6.7. Интернет-ресурс

1. ВИНИТИ (<http://www.viniti.ru>)

2. Грамота.ру (<http://www.gramota.ru/>)

3. Единое окно доступа к образовательным ресурсам - информационная система (<http://window.edu.ru/>)

4. КиберЛенинка - научная электронная библиотека (<http://cyberleninka.ru/>)
5. Научная педагогическая электронная библиотека (НПЭБ) (<http://elib.gnpbu.ru>)
6. Официальный сайт Министерства промышленности и торговли Российской Федерации. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://minpromtorg.gov.ru/>
7. Официальный сайт Министерства науки и высшего образования Российской Федерации. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://minobrnauki.gov.ru/>
8. Официальный сайт Высшей аттестационной комиссии при Министерстве науки и высшего образования Российской Федерации. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://vak.ed.gov.ru/>
9. Официальный сайт российского фонда фундаментальных исследований. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.rfbr.ru/rffi/ru/>
10. Российская национальная библиотека (http://primo.nl.ru/primo_library/libweb/action/search.do?menuitem=2&catalog=true)
11. УИС РОССИЯ (<http://uisrussia.msu.ru>)
12. Электронная библиотека диссертаций (<https://dvs.rsl.ru>). *Правообладатель: ФГБУ «Российская государственная библиотека».*
13. Электронные коллекции на портале Президентской библиотеки им. Б. Н. Ельцина (<http://www.prlib.ru/collections>)
14. BIBLIOPHIKA (<http://www.bibliofika.ru/>)
15. MDPI - Multidisciplinary Digital Publishing Institute (Basel, Switzerland) (<http://www.mdpi.com/>)

5.6.8. Методические материалы

1. Насырова, Э. Ф. Технология подготовки и защиты научно-исследовательской работы [Текст] : учебное пособие / Э. Ф. Насырова, Ф. Д. Рассказов ; Департамент образования и молодежной политики Ханты-Мансийского автономного округа - Югры, БУ ВО "Сургутский государственный университет", Кафедра педагогики профессионального и дополнительного образования. Сургут : Издательский центр СурГУ, 2018. 93 с.
2. Государственная итоговая аттестация по программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре [Электронный ресурс] : методические указания для аспирантов СурГУ / Департамент образования и молодежной политики Ханты-Мансийского автономного округа - Югры, БУ ВО Ханты-Мансийского автономного округа - Югры "Сургутский государственный университет" ; [сост. Е. В. Воронина] .— Электронные текстовые данные (1 файл: 916 912 байт) .— Сургут : Сургутский государственный университет, 2019 .— Заглавие с титульного экрана .— Коллекция: Учебно-методические пособия СурГУ .— Режим доступа: Корпоративная сеть СурГУ или с любой точки подключения к Интернет, по логину или паролю .— Системные требования: Adobe Acrobat Reader .— <URL:<https://elib.surgu.ru/fulltext/umm/5981>>.
3. Райзберг, Борис Абрамович. Диссертация и ученая степень: Новые положения о защите и диссертационных советах с авторскими комментариями (пособие для соискателей) Научно-практическое пособие : Аспирантура, перераб. и доп. Москва : ООО "Научно-издательский центр ИНФРА-М", 2019. -253 с. URL: <http://new.znaniium.com/go.php?id=1005680ISBN 9785160056401>

5.7. Материально-техническое обеспечение представления научного доклада

Лекционная аудитория оснащена специализированной мебелью и техническими средствами обучения: меловая доска, мобильный проекционный экран, портативный проектор, ноутбук, точка доступа Wi-Fi.

6. ПОРЯДОК АПЕЛЛЯЦИИ РЕЗУЛЬТАТОВ ГОСУДАРСТВЕННОЙ ИТОГОВОЙ АТТЕСТАЦИИ

Апелляция может быть подана не позднее следующего рабочего дня после прохождения ГИА.

Для рассмотрения апелляций приказом ректора создается апелляционная комиссия в количестве не менее четырех человек из числа профессорско-преподавательского состава и (или)

научных работников Университета, не входящих в состав ГЭК.

Председателем апелляционной комиссии является ректор Университета. В случае отсутствия ректора председателем является лицо, исполняющее обязанности ректора на основании приказа по Университету.

Обучающийся имеет право подать в апелляционную комиссию в письменном виде апелляцию о нарушении, по его мнению, установленной процедуры проведения государственного аттестационного испытания и (или) несогласия с результатами государственного экзамена.

Для рассмотрения апелляции секретарь государственной экзаменационной комиссии направляет в апелляционную комиссию протокол заседания государственной экзаменационной комиссии, заключение председателя государственной экзаменационной комиссии о соблюдении процедурных вопросов при проведении государственного аттестационного испытания, а также письменные ответы обучающегося (при их наличии) (для рассмотрения апелляции по проведению государственного экзамена).

Апелляция подлежит рассмотрению не позднее двух рабочих дней со дня подачи апелляции на заседании апелляционной комиссии, на которое приглашаются председатель ГЭК и аспирант, подавший апелляцию.

При рассмотрении апелляции о нарушении процедуры проведения государственного аттестационного испытания апелляционная комиссия принимает одно из следующих решений:

- об отклонении апелляции, если изложенные в ней сведения о нарушениях процедуры проведения ГИА обучающегося не подтвердились и/или не повлияли на результат ГИА;
- об удовлетворении апелляции, если изложенные в ней сведения о допущенных нарушениях процедуры проведения ГИА обучающегося подтвердились и повлияли на результат ГИА.

При рассмотрении апелляции о несогласии с результатами государственного экзамена апелляционная комиссия выносит одно из следующих решений:

- об отклонении апелляции и сохранении результата государственного экзамена;
- об удовлетворении апелляции и выставлении иного результата государственного экзамена.

Решение апелляционной комиссии не позднее следующего рабочего дня передается в ГЭК. Решение апелляционной комиссии является основанием для аннулирования ранее выставленного результата государственного экзамена и выставления нового.

Решение апелляционной комиссии доводится до сведения аспиранта, подавшего апелляцию, в течение 3 рабочих дней со дня заседания апелляционной комиссии. Факт ознакомления аспиранта, подавшего апелляцию, с решением апелляционной комиссии удостоверяется подписью аспиранта. Решение апелляционной комиссии является окончательным и пересмотру не подлежит.

Повторное проведение ГИА осуществляется в присутствии одного из членов апелляционной комиссии не позднее даты завершения обучения аспиранта, подавшего апелляцию. Апелляция на повторное проведение аттестационного испытания не принимается.

7. 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 образовательных программ и методов обучения и воспитания,
- использование специальных учебников, учебных пособий и дидактических материалов,
- использование специальных технических средств обучения коллективного и индивидуального пользования,
- предоставление услуг ассистента (помощника), оказывающего обучающимся необходимую техническую помощь,
- проведение групповых и индивидуальных коррекционных занятий,
- обеспечение доступа в здания организаций и другие условия, без которых невозможно или затруднено освоение программы аспирантуры.

В целях доступности получения высшего образования по программам аспирантуры инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья обеспечивается:

1) для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по зрению:

наличие альтернативной версии официального сайта организации в сети "Интернет" для слабовидящих;

размещение в доступных для обучающихся, являющихся слепыми или слабовидящими, местах и в адаптированной форме (с учетом их особых потребностей) справочной информации о расписании учебных занятий (информация должна быть выполнена крупным рельефно-контрастным шрифтом (на белом или желтом фоне) и продублирована шрифтом Брайля);

присутствие ассистента, оказывающего обучающемуся необходимую помощь;

обеспечение выпуска альтернативных форматов печатных материалов (крупный шрифт или аудиофайлы);

обеспечение доступа обучающегося, являющегося слепым и использующего собаку-поводыря, к зданию организации;

2) для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по слуху:

дублирование звуковой справочной информации о расписании учебных занятий визуальной (установка мониторов с возможностью трансляции субтитров (мониторы, их размеры и количество необходимо определять с учетом размеров помещения));

обеспечение надлежащими звуковыми средствами воспроизведения информации;

3) для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья, имеющих нарушения опорно-двигательного аппарата, материально-технические условия обеспечивают возможность 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).

При получении высшего образования по программам аспирантуры обучающимся с ограниченными возможностями здоровья предоставляются бесплатно специальные учебники и учебные пособия, иная учебная литература, а также услуги сурдопереводчиков и тифлосурдопереводчиков.

**БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
ХАНТЫ-МАНСИЙСКОГО АВТОНОМНОГО ОКРУГА – ЮГРЫ
«Сургутский государственный университет»**

ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА

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, 2021 г.

ЭТАП: ПРОВЕДЕНИЕ ГОСУДАРСТВЕННОГО ЭКЗАМЕНА

1. Результаты итогового контроля Государственной итоговой аттестации на этапе проведения государственного экзамена оцениваются по 4-балльной шкале с оценками:

- «отлично»;
- «хорошо»;
- «удовлетворительно»;
- «неудовлетворительно».

Планируемые результаты обучения	Оценка	Критерии оценивания
Знания (п.3 РПД)	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	фрагментарные представления об основных требованиях, предъявляемых к преподавателям в системе высшего образования
Умения (п.3 РПД)	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
Навыки (опыт деятельности) (п.3 РПД)	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

3. Оценочные материалы сформированности компетенций

Оценочные средства представляют собой **фонд контрольных заданий**, а также описаний форм и процедур, предназначенных для определения степени сформированности результатов обучения аспиранта.

№ п/п	Проверяемые компетенции	Примерные формулировки оценочных заданий	Методические рекомендации по выполнению оценочных заданий
1.	УК-4; ОПК-1; ОПК-2; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5	Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия.	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-4; ОПК-1; ОПК-2; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5	Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы. Ферментативный катализ.	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-4; ОПК-1; ОПК-2; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5	Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Бренстеда.	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-4; ОПК-1; ОПК-2; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5	Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Динамический характер адсорбционного равновесия.	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-4; ОПК-1; ОПК-2; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5	Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Лэнгмюра.	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-4; ОПК-1; ОПК-2; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5	Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри.	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-4; ОПК-1; ОПК-2; ПК-1, ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5	Количественной мерой устойчивости кристалла является энергия кристаллической решётки. Например, для хлорида натрия эта энергия равна энтальпии реакции $\text{NaCl}(т) = \text{Na}^+(г) + \text{Cl}^-(г)$. Энергию кристаллической решётки нельзя измерить экспериментально, но можно определить с помощью термодимического цикла, предложенного М. Борном и Ф. Габером. Энтальпию образования 1 моль хлорида натрия из твёрдого натрия и газообразного хлора можно измерить: $\text{Na}(г) + 1/2 \text{Cl}_2(г) = \text{NaCl}(т)$ $\Delta H = -411 \text{ кДж/моль}$. Используя цикл Борна–Габера, представим, что этот процесс протекает в пять стадий: 1. Превращение твёрдого натрия в газ: $\text{Na}(т) = \text{Na}(г)$, ΔH_1 .	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. Превращение атомов натрия в положительные ионы: $\text{Na}(\text{г}) = \text{Na}^+(\text{г}) + \text{e}^-$, ΔH_2 .

3. Диссоциация молекул хлора на атомы: $\text{Cl}_2(\text{г}) = 2\text{Cl}(\text{г})$, ΔH_3 .

4. Превращение атомов хлора в отрицательные ионы: $\text{Cl}(\text{г}) + \text{e}^- = \text{Cl}^-(\text{г})$, ΔH_4 .

5. Взаимодействие ионов натрия и хлора с образованием кристаллического NaCl : $\text{Na}^+(\text{г}) + \text{Cl}^-(\text{г}) = \text{NaCl}(\text{т})$, ΔH_5 .

Задания

1. В правой колонке таблицы приведены значения ΔH перечисленных реакций (в неверном порядке). Расположите значения ΔH реакций в правильном порядке в левой колонке.

ΔH_1	-349 кДж/моль
ΔH_2	107 кДж/моль
ΔH_3	244 кДж/моль
ΔH_4	496 кДж/моль

2. Используя приведённые данные, рассчитайте энергию кристаллической решётки хлорида натрия. Каков знак полученного значения энергии кристаллической решётки (положительный или отрицательный)? Качественно предскажите, как от энергии кристаллической решётки NaCl будут отличаться энергии решёток LiCl , KCl , NaF и NaBr (больше или меньше).

3. Энтальпии гидратации ионов $\text{Na}^+(\text{г})$ и $\text{Cl}^-(\text{г})$ равны -406 кДж/моль и -377 кДж/моль соответственно. Выделяется или поглощается теплота при растворении кристаллического хлорида натрия в воде? Ответ подтвердите расчётом энтальпии реакции растворения.

8. УК-4; ОПК-1; ОПК-2; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5

Значения энергий связей С–Н являются постоянными для ряда алканов и не зависят от того, в каком конкретном соединении они находятся. Это значит, что реакционная способность атомов водорода в реакции свободнорадикального замещения оценивается одними и теми же величинами. Оцените отношение реакционной способности первичной, вторичной, третичной связей С–Н в реакции хлорирования. Известно, что при

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.

		<p>хлорировании пропана, инициированном ультрафиолетовым облучением (25 °С), получено 56 % 2-хлорпропана и 44 % 1-хлорпропана. Для оценки активности третичной связи используйте данные хлорирования изобутана – 35,7 % 2-метил-2-хлорпропана и 64,3 % 2-метил-1-хлорпропана.</p>													
9.	УК-4; ОПК-1; ОПК-2; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5	<p>Возможно ли при стандартных условиях ($T = 298 \text{ K}$, $p = 101,3 \text{ кПа}$) разложение нитрата аммония по уравнению: $\text{NH}_4\text{NO}_3(\text{т}) = \text{N}_2\text{O}(\text{г}) + 2\text{H}_2\text{O}$? Ответ подтвердите расчётом ΔG_{298} (в кДж) реакции. Необходимые данные указаны в таблице:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Вещество[□]</th> <th>$\Delta H_{298}^\circ, \text{кДж/моль}^\square$</th> <th>$S_{298}^\circ, \text{Дж/(моль·К)}^\square$</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>$\text{NH}_4\text{NO}_3^\square$</td> <td>-365,10[□]</td> <td>150,60[□]</td> </tr> <tr> <td>$\text{N}_2\text{O}_\text{г}^\square$</td> <td>81,55[□]</td> <td>220,0[□]</td> </tr> <tr> <td>$\text{H}_2\text{O}_\text{л}^\square$</td> <td>-241,84[□]</td> <td>188,74[□]</td> </tr> </tbody> </table>	Вещество [□]	$\Delta H_{298}^\circ, \text{кДж/моль}^\square$	$S_{298}^\circ, \text{Дж/(моль·К)}^\square$	$\text{NH}_4\text{NO}_3^\square$	-365,10 [□]	150,60 [□]	$\text{N}_2\text{O}_\text{г}^\square$	81,55 [□]	220,0 [□]	$\text{H}_2\text{O}_\text{л}^\square$	-241,84 [□]	188,74 [□]	<p>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.</p>
Вещество [□]	$\Delta H_{298}^\circ, \text{кДж/моль}^\square$	$S_{298}^\circ, \text{Дж/(моль·К)}^\square$													
$\text{NH}_4\text{NO}_3^\square$	-365,10 [□]	150,60 [□]													
$\text{N}_2\text{O}_\text{г}^\square$	81,55 [□]	220,0 [□]													
$\text{H}_2\text{O}_\text{л}^\square$	-241,84 [□]	188,74 [□]													
10.	УК-4; ОПК-1; ОПК-2; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5	<p>Рассчитайте состав раствора бензол-толуол, который при нормальном давлении кипит при температуре 100 °С, а также состав образующегося пара. Раствор считайте идеальным, Давления пара чистых бензола и толуола при 100 °С равны 1350 Торр и 556 Торр, соответственно.</p>	<p>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.</p>												

Получение оценок «Отлично», «Хорошо», «Удовлетворительно» означает успешное прохождение государственного аттестационного испытания.

Комплектование заданий (вопросов) в экзаменационном билете

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

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УМР
Коновалова Е.В.

« _____ » _____ 20__ г

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки
Направленность программы:
Физическая химия

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ЭКЗАМЕН Билет № 1

1. Электронное строение атомов и молекул. Одноэлектронное приближение. Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Правило Хунда. Электронная плотность. Теорема Купманса. Пределы применимости одноэлектронного приближения.
2. Растворы Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля. Неидеальные растворы и их свойства. Коэффициенты активности и их определение.
3. Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы её определения. Энергия активации. Уравнение Аррениуса. Методы определения энергии активации.

Утвержден на заседании кафедры химии « _____ » _____ 202__ г. протокол № _____
Зав. кафедрой _____

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

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УМР
Коновалова Е.В.

« _____ » _____ 20__ г

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки
Направленность программы:
Физическая химия

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ЭКЗАМЕН Билет № 2

1. Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, интенсивные и экстенсивные переменные. Уравнения состояния.
2. Коллигативные свойства растворов. Парциальные мольные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса – Дюгема.
3. Кинетика сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций.

Утвержден на заседании кафедры химии « _____ » _____ 20__ г. протокол № _____
Зав. кафедрой _____

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

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УМР

Коновалова Е.В.

« ____ » _____ 20__ г

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки
Направленность программы:
Физическая химия

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ЭКЗАМЕН
Билет № 3

1. Первый закон термодинамики. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия, теплоемкость. Закон Гесса. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры.
2. Термодинамическая классификация растворов. Функции смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства.
3. Фотохимические реакции. Элементарные фотохимические процессы. Эксимеры и эксиплексы. Квантовый выход. Закон Эйнштейна – Штарка.

Утвержден на заседании кафедры химии « ____ » _____ 20__ г. протокол № _____

Зав. кафедрой

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

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УМР

Коновалова Е.В.

« ____ » _____ 20__ г

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки
Направленность программы:
Физическая химия

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ЭКЗАМЕН
Билет № 4

1. Второй закон термодинамики. Энтропия. Изменение энтропии в обратимых и необратимых процессах.
2. Цепные реакции. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций. Предельные явления в разветвленных цепных реакциях: полуостров воспламенения, период индукции. Тепловой взрыв.
3. Гомогенный и гетерогенный катализ. Принцип действия катализаторов. Классификация каталитических реакций. Основные промышленные каталитические процессы.

Утвержден на заседании кафедры химии « ____ » _____ 20__ г. протокол № _____

Зав. кафедрой

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

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УМР
Коновалова Е.В.

« ____ » _____ 20__ г

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки
Направленность программы:
Физическая химия

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ЭКЗАМЕН
Билет № 5

1. Уравнение Гиббса – Гельмгольца. Работа и теплота химического процесса. Химические потенциалы.
2. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты.
3. Мономолекулярные реакции в газах, схема Линдемана – Христиансена. Теория РРКМ. Бимолекулярные и тримолекулярные реакции, зависимость предэкспоненциального множителя от температуры.

Утвержден на заседании кафедры химии « ____ » _____ 20__ г. протокол № _____

Зав. кафедрой

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

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УМР
Коновалова Е.В.

« ____ » _____ 20__ г

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки
Направленность программы:
Физическая химия

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ЭКЗАМЕН
Билет № 6

1. Химическое равновесие. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции. Расчеты констант равновесия химических реакций.
2. Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Равновесие жидкость – пар в двухкомпонентных системах. Законы Гиббса – Коновалова. Азеотропные смеси.
3. Скорость и стадии электродного процесса. Поляризация электродов. Полярография. Ток обмена и перенапряжение. Зависимость скорости стадии разряда от строения двойного слоя.

Утвержден на заседании кафедры химии « ____ » _____ 20__ г. протокол № _____

Зав. кафедрой

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

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УМР

Коновалова Е.В.

« ____ » _____ 20__ г.

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки
Направленность программы:
Физическая химия

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ЭКЗАМЕН
Билет № 7

1. 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.
2. Основные понятия химической кинетики. Простые и сложные реакции, молекулярность, скорость простой реакции, порядок реакции. Основной постулат химической кинетики. Способы определения скорости реакции, константа скорости и порядка реакции.
3. Ферментативный катализ и его особенности. Механизмы ферментативного катализа. Ингибирование ферментативных реакций.

Утвержден на заседании кафедры химии « ____ » _____ 20__ г. протокол № _____

Зав. кафедрой

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

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УМР

Коновалова Е.В.

« ____ » _____ 20__ г.

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки
Направленность программы:
Физическая химия

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ЭКЗАМЕН
Билет № 8

1. Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца. Уравнения Максвелла. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов.
2. Растворы электролитов. Коэффициенты активности в растворах электролитов. Средняя активность и средний коэффициент активности, их связь с активностью отдельных ионов. Основные положения теории Дебая – Хюккеля.
3. Приближенные методы решения кинетических уравнений. Квазистационарное приближение. Метод Боденштейна – Тёмкина.

Утвержден на заседании кафедры химии « ____ » _____ 20__ г. протокол № _____

Зав. кафедрой

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

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УМР

Коновалова Е.В.

« ____ » _____ 20__ г.

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки
Направленность программы:
Физическая химия

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ЭКЗАМЕН
Билет № 9

1. Гетерогенные системы. Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса. Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды, серы, фосфора и углерода. Уравнение Клапейрона – Клаузиуса.
2. Теория переходного состояния (активированного комплекса). Поверхность потенциальной энергии. Путь и координата реакции. Статистический расчет константы скорости.
3. Химические источники тока, их виды. Электрохимическая коррозия. Методы защиты от коррозии.

Утвержден на заседании кафедры химии « ____ » _____ 20__ г. протокол № _____
Зав. кафедрой _____

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

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УМР

Коновалова Е.В.

« ____ » _____ 20__ г.

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки
Направленность программы:
Физическая химия

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ЭКЗАМЕН
Билет № 10

1. Адсорбция. Виды адсорбции. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Уравнение Фрейндлиха, уравнение Ленгмюра. Уравнение Брунауэра – Эмета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента
2. Кинетика гетерогенных каталитических реакций. Различные режимы протекания реакций (кинетическая и внешняя кинетическая области, области внешней и внутренней диффузии).
3. Электрохимические реакции. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Теория Гуи – Чапмена – Грэма. Электрокапиллярные явления, уравнение Липпмана. Электрокинетические свойства коллоидных систем. Электрофорез и электроосмос. Электрокинетический потенциал.

Утвержден на заседании кафедры химии « ____ » _____ 20__ г. протокол № _____
Зав. кафедрой _____

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

1. Результаты государственной итоговой аттестации на этапе представления научного доклада подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации) оцениваются по 4-балльной шкале с оценками:

- «отлично»;
- «хорошо»;
- «удовлетворительно»;
- «неудовлетворительно».

Планируемые результаты обучения	Оценка	Критерии оценивания
Знания (п.3 РПД)	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.
Умения (п.3 РПД)	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.
Навыки (опыт деятельности) (п.3 РПД)	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.

2. Оценочные материалы сформированности компетенций

№ п/п	Проверяемые компетенции	Формулировка оценочного задания	Методические рекомендации по выполнению оценочных заданий
1	ПК-2, ПК-3, ПК-4, ПК-5	Актуальность исследования	Представление научного доклада по данному оценочному заданию оценивается в баллах по шкале 0-1-2: 0 баллов – оценочное задание не выполнено; 1 балл – оценочное задание выполнено с замечаниями; 2 балла – оценочное задание выполнено без замечаний.
2	ПК-2, ПК-3, ПК-4, ПК-5	Анализ степени разработанности темы исследования	Представление научного доклада по данному оценочному заданию оценивается в баллах по шкале 0-1-2: 0 баллов – оценочное задание не выполнено; 1 балл – оценочное задание выполнено с замечаниями; 2 балла – оценочное задание выполнено без замечаний.
3	ПК-2, ПК-3, ПК-4, ПК-5	Цель и задачи исследования	Представление научного доклада по данному оценочному заданию оценивается в баллах по шкале 0-1-2: 0 баллов – оценочное задание не выполнено; 1 балл – оценочное задание выполнено с замечаниями; 2 балла – оценочное задание выполнено без замечаний.
4	ПК-2, ПК-3, ПК-4, ПК-5	Научная новизна	Представление научного доклада по данному оценочному заданию оценивается в баллах по шкале 0-1-2: 0 баллов – оценочное задание не выполнено; 1 балл – оценочное задание выполнено с замечаниями; 2 балла – оценочное задание выполнено без замечаний.

5	ПК-1, ПК-2, ПК-3, ПК-4, ПК-5	Методология и методы исследования	Представление научного доклада по данному оценочному заданию оценивается в баллах по шкале 0-1-2: 0 баллов – оценочное задание не выполнено; 1 балл – оценочное задание выполнено с замечаниями; 2 балла – оценочное задание выполнено без замечаний.
6	ПК-2, ПК-3, ПК-4, ПК-5	Аргументированность, степень обоснованности выводов, рекомендаций, положений	Представление научного доклада по данному оценочному заданию оценивается в баллах по шкале 0-1-2: 0 баллов – оценочное задание не выполнено; 1 балл – оценочное задание выполнено с замечаниями; 2 балла – оценочное задание выполнено без замечаний.
7	ПК-2, ПК-3, ПК-4, ПК-5	Самостоятельность исследования	Представление научного доклада по данному оценочному заданию оценивается в баллах по шкале 0-1-2: 0 баллов – оценочное задание не выполнено; 1 балл – оценочное задание выполнено с замечаниями; 2 балла – оценочное задание выполнено без замечаний.
8	ПК-2, ПК-3, ПК-4, ПК-5	Достоверность и апробация результатов исследования	Представление научного доклада по данному оценочному заданию оценивается в баллах по шкале 0-1-2: 0 баллов – оценочное задание не выполнено; 1 балл – оценочное задание выполнено с замечаниями; 2 балла – оценочное задание выполнено без замечаний.
9	ПК-2, ПК-3, ПК-4, ПК-5	Теоретическая и практическая значимость	Представление научного доклада по данному оценочному заданию оценивается в баллах по шкале 0-1-2: 0 баллов – оценочное задание не выполнено; 1 балл – оценочное задание выполнено с замечаниями; 2 балла – оценочное задание выполнено без замечаний.
10	ПК-1	Доклад и презентация	Представление научного доклада по данному оценочному заданию оценивается в баллах по шкале 0-1-2: 0 баллов – оценочное задание не выполнено; 1 балл – оценочное задание выполнено с замечаниями; 2 балла – оценочное задание выполнено без замечаний.

Максимальное количество баллов, которое аспирант может получить на этапе представления научного доклада об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации) – 20 баллов. Итоговая оценка представляет собой сумму оценок, полученных по каждому оценочному заданию. При подведении итогов государственного экзамена устанавливаются следующие критерии оценок:

16-20 баллов – оценка «Отлично»;
10-15 баллов – оценка «Хорошо»;
5-9 баллов – оценка «Удовлетворительно»;
0-4 балла – оценка «Неудовлетворительно».

Получение оценок «Отлично», «Хорошо», «Удовлетворительно» означает успешное прохождение государственного аттестационного испытания.

Методические рекомендации по подготовке научно квалификационной работы (диссертации) на соискание ученой степени кандидата наук

Общие требования

Целью подготовки и защиты научно-квалификационной работы (диссертации) (далее – НКР) является проведение научных исследований, соответствующих направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки» направленность Физическая химия, а также формирование навыков самостоятельного решения задач, возникающих в ходе исследований, обработки полученных статистических и теоретических результатов, позволяющих подготовить научно-квалификационную работу, соответствующую критериям, установленным для соискания ученой степени кандидата наук.

Научно-квалификационной работой выступает подготовленное аспирантом диссертационное исследование, отвечающее требованиям, предъявляемым диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук в соответствии с Постановлением Правительства от 24 сентября 2013 г. № 842 «О порядке присуждения ученых степеней».

НКР должна быть научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задачи, имеющей значение для развития соответствующей отрасли знаний, либо изложены новые научно обоснованные технические, технологические или иные решения и разработки, имеющие существенное значение для развития страны.

Время, отводимое на подготовку работы, определяется учебным планом соответствующей образовательной программы. НКР выполняется на базе теоретических знаний и практических навыков, полученных аспирантом в период обучения. При этом она должна быть ориентирована, как правило, на знания, полученные в процессе изучения обязательных дисциплин и дисциплин по выбору и подтверждать его профессиональные и общепрофессиональные компетенции.

Общие требования к НКР заключаются в следующем:

- соответствие названия работы ее содержанию, четкая направленность, актуальность;
- соответствовать основной проблематике научной специальности, по которой выполнена кандидатская диссертация, паспорту научной специальности;
- иметь теоретическую и практическую значимость;
- основываться на современных теоретических, методических и технологических достижениях отечественной и зарубежной науки и практики;
- использовать современную методику научных исследований;
- логическая последовательность изложения материала, базирующаяся на прочных теоретических знаниях по избранной теме и убедительных аргументах;
- базироваться на современных методах обработки и интерпретации данных с применением компьютерных технологий;
- корректное изложение материала с учетом принятой научной терминологии;
- отвечать четкому построению и логической последовательности изложения материала;
- содержать убедительную аргументацию, для этого в тексте может быть использован графический материал (таблицы, иллюстрации и пр.);
- содержать теоретические (методические, практические) разделы, согласованные с научными положениями.

НКР должна быть написана автором самостоятельно, обладать внутренним единством, содержать новые научные результаты и положения, выдвигаемые для публичной защиты, и свидетельствовать о личном вкладе автора работы в науку.

В НКР, имеющей прикладной характер, должны приводиться сведения о практическом использовании полученных автором научных результатов, а в НКР, имеющей теоретический характер, - рекомендации по использованию научных выводов.

Предложенные автором решения должны быть аргументированы и оценены по сравнению с другими известными решениями. Основные научные результаты должны быть опубликованы в рецензируемых научных изданиях. Требования к рецензируемым изданиям и правила формирования в уведомительном порядке их перечня устанавливаются Министерством образования и науки Российской Федерации. Количество публикаций, в которых излагаются основные научные результаты диссертации на соискание ученой степени кандидата наук, в рецензируемых изданиях должно быть - не менее 2.

В НКР обязан сослаться на автора и (или) источник заимствования материалов или отдельных результатов. При использовании результатов научных работ, выполненных соискателем ученой степени лично и (или) в соавторстве, соискатель ученой степени обязан отметить в работе это обстоятельство.

НКР не должна содержать:

- заимствованный материал без ссылки на автора и (или) источник заимствования, результатов научных работ, выполненных соискателем ученой степени в соавторстве, без ссылок на соавторов;
- недостоверные сведения об опубликованных работах, в которых изложены основные научные результаты.

Требования к оформлению НКР

НКР должна быть оформлена в соответствии с существующими обязательными требованиями.

Общие требования к оформлению кандидатских диссертаций установлены ГОСТ 7.0.11-2011 «Диссертация и автореферат диссертации. Структура и правила оформления».

НКР должна быть представлена в виде специально подготовленной рукописи, которая должна иметь следующую структуру:

- титульный лист;
- оглавление с указанием номеров страниц;
- текст диссертации, который состоит из элементов:
 - 1) введение;
 - 2) основная часть (главы, параграфы, пункты, подпункты);
 - 3) заключение, содержащее итоги выполненного исследования, рекомендации;
- список сокращений и условных обозначений;
- словарь терминов;
- список использованных источников;
- список иллюстрированного материала;
- приложения.

Введение к НКР включает в себя следующие основные структурные элементы:

- актуальность темы исследования;
- степень ее разработанности;
- цели и задачи;
- научную новизну; теоретическую и практическую значимость работы;
- методологию и методы исследования;
- положения, выносимые на защиту и степень их достоверности;
- степень достоверности и апробацию результатов.

Основной текст должен быть разделен на главы и параграфы или разделы и подразделы, которые нумеруют арабскими цифрами. В заключении НКР излагают итоги выполненного исследования, рекомендации, перспективы дальнейшей разработки темы. Каждую главу (раздел) НКР начинают с новой страницы. Заголовки располагают посередине страницы без точки на конце. Переносить слова в заголовке не допускается. Заголовки отделяют от текста сверху и снизу тремя интервалами. Работа должна быть выполнена печатным способом с использованием компьютера и принтера на одной стороне листа белой бумаги одного сорта формата А4 (210x297 мм) через

полтора интервала и размером шрифта 12-14 пунктов. Иллюстративный материал может быть представлен рисунками, фотографиями, картами, нотами, графиками, чертежами, схемами, диаграммами и другим подобным материалом. Иллюстрации, используемые в НКР, размещают под текстом, в котором впервые дана ссылка на них, или на следующей странице, а при необходимости – в приложении к НКР. Допускается использование приложений нестандартного размера, которые в сложенном виде соответствуют формату А4. Иллюстрации нумеруют арабскими цифрами сквозной нумерацией или в пределах главы (раздела). На все иллюстрации должны быть приведены ссылки в тексте НКР. При ссылке следует писать слово «Рисунок» с указанием его номера.

Общая характеристика работы включает в себя следующие основные структурные элементы:

- актуальность темы исследования;
- степень ее разработанности;
- цели и задачи;
- научную новизну;
- теоретическую и практическую значимость работы;
- методологию и методы исследования;
- положения, выносимые на защиту;
- степень достоверности и апробацию результатов.

Библиографические записи оформляют в соответствии с требованиями ГОСТ 7.1.

Подготовка и защита научно-квалификационной работы

Подготовка и защита НКР состоит из следующих этапов: определение темы НКР, организация работы над НКР, допуск к защите и защита НКР.

Аспиранту предоставляется право формулирования темы НКР с необходимым обоснованием целесообразности ее разработки для практического применения и решения актуальной научной проблемы. Данное право реализуется в написании заявления с указанием темы. Контроль за выбором темы и ее соответствием паспорту научной специальности возлагается на научного руководителя.

По согласованию с руководителем возможна корректировка (уточнение) выбранной темы, но не позднее, чем за месяц до срока защиты. Все изменения утверждаются приказом ректора, на основании служебной записки заведующего выпускающей кафедрой.

Для подготовки научно-квалификационной работы аспиранту назначается руководитель. Для руководства отдельными разделами НКР, связанными с использованием материала узко специальных научных направлений, а также в тех случаях, когда тематика НКР носит междисциплинарный характер (особенно, если дисциплины читаются преподавателями разных кафедр), могут назначаться консультанты. Заведующие выпускающими кафедрами, до начала выполнения научно-квалификационных работ составляют расписание консультаций на весь период выполнения работ и доводят его до сведения аспирантов.

К защите НКР допускаются аспиранты, завершившие образовательный процесс в соответствии с требованиями учебного плана и успешно сдавшие государственный экзамен по направлению подготовки.

Перед защитой НКР назначаются два рецензента НКР, являющиеся квалифицированными специалистами в области научного исследования и имеющие научные публикации в данной области. В рецензии отражается актуальность избранной темы, степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в работе, их достоверность и новизна, а также дается заключение о соответствии работы критериям, установленным Положением «О порядке присуждения ученых степеней». Рецензия подписывается рецензентом с указанием его ученой степени, звания, должности и места работы. Подпись рецензента заверяется в установленном порядке.

Продолжительность защиты одной работы, как правило, не должна превышать более 1 часа 30 минут.

Критерии оценивания результатов защиты НКР

Общими критериями оценки НКР являются:

- актуальность темы для будущей профессиональной деятельности, соответствие

- содержания теме, полнота ее раскрытия; научная новизна, теоретическая и практическая значимость;
- уровень осмысления теоретических вопросов и обобщения собранного материала, обоснованность и четкость сформулированных выводов; четкость структуры работы и логичность изложения материала, методологическая обоснованность исследования; комплексность методов исследования, применение современных технологий (в том числе информационных), их адекватность задачам исследования; владение научным стилем изложения, профессиональной терминологией, орфографическая и пунктуационная грамотность;
- обоснованность и ценность (инновационность) полученных результатов исследования и выводов, возможность их применения в профессиональной деятельности выпускника;
- применение иноязычных источников (в том числе переводных) по исследуемой теме;
- соответствие формы представления НКР всем требованиям, предъявляемым к оформлению работ;
- качество устного доклада, свободное владение материалом НКР;
- глубина и точность ответов на вопросы, замечания и рекомендации во время защиты НКР.

Ответственность и полномочия участников процесса подготовки НКР

Ответственность и полномочия по процессу подготовки и защиты НКР распределены между его участниками: аспирантом, научным руководителем, рецензентом, заведующим кафедрой.

Аспирант в процессе подготовки НКР выполняет следующие функции:

- самостоятельно оценивает актуальность и значимость научной проблемы, связанной с темой НКР;
- совместно с руководителем уточняет индивидуальный план;
- осуществляет сбор и обработку исходной информации по теме НКР, изучает и анализирует полученные материалы;
- самостоятельно формулирует цель и задачи НКР, научную проблему;
- оформляет решение задач в тексте НКР, графическую часть и другую техническую и технологическую документацию, иллюстративный материал;
- проводит обоснование темы (проблемы), исследования, разработки, расчетов в соответствии с заданием на НКР;
- даёт профессиональную аргументацию своего варианта решения проблемы;
- подготавливает презентацию и сопутствующие средства представления результатов НКР (разработанные формы документации, графики документооборота и т.д.);
- формулирует логически обоснованные выводы, предложения и рекомендации по внедрению полученных результатов в практику; - готовит доклад для защиты НКР.

Ответственность за сведения (и/или данные), представленные в НКР, их достоверность несёт автор НКР.

Научный руководитель НКР выполняет следующие функции:

- формулирует задание на НКР;
- оказывает аспиранту консультативную помощь в организации и выполнении работы,
- контролирует ход выполнения НКР и ее соответствие настоящему положению;
- консультирует аспиранта по выбору литературы, методов исследования по теме НКР;
- принимает участие в защите НКР;
- дает письменный отзыв о работе аспиранта по подготовке НКР.

Научный руководитель несет ответственность за завершенность проведенного исследования, что подтверждается отзывом и подписью руководителя на титульном листе.

Консультант по отдельному разделу НКР выполняет следующие функции:

- по согласованию с руководителем НКР формулирует задание на выполнение соответствующего раздела;
- определяет структуру соответствующего раздела НКР;
- оказывает методическую помощь аспиранту через консультации, оценивает допустимость принятых решений;
- проверяет соответствие объема и содержания раздела заданию;

- делает вывод о готовности соответствующего раздела НКР к защите, что подтверждается подписью на титульном листе.

Заведующий выпускающей кафедрой выполняет следующие функции:

- инициирует формулирование тем потенциальными руководителями;
- организует обсуждение тематики НКР на заседании кафедры и утверждает тематику, руководителей и прикрепление аспирантов;
- утверждает задания на НКР и график их выполнения (при наличии);
- организует заседания кафедры, посвященные предварительной защите НКР;
- утверждает готовность и завершенность НКР подписью на титульном листе;
- при необходимости ставит на заседании кафедры вопрос о невыполнении графика работы над НКР с целью принятия корректирующих действий;
- организует рассмотрение отчетов руководителей о ходе выполнения НКР на заседании кафедры.

Рецензент по отношению к НКР выступает в роли стороннего эксперта. В соответствии с этим его рецензия должна содержать разностороннюю характеристику содержания НКР. Он дает оценку раскрытия степени актуальности темы работы, соответствие представленного материала заданию на НКР, уровень выполнения НКР.