

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Вятский государственный университет»
(ВятГУ)



УТВЕРЖДАЮ
Председатель приемной комиссии,
ректор ВятГУ

В.Н. Пугач

Протокол заседания
приемной комиссии
от 24.03.2022 № 2

ПРОГРАММА ВСТУПИТЕЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ
ПО ПРОГРАММЕ ПОДГОТОВКИ НАУЧНЫХ И НАУЧНО-ПЕДАГОГИЧЕСКИХ
КАДРОВ В АСПИРАНТУРЕ

1.4.4 ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

научная специальность

1.4. ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

группа научных специальностей

ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

отрасль науки

СПЕЦИАЛЬНАЯ ДИСЦИПЛИНА
«ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

Киров
2022

1. ОБЛАСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ И НОРМАТИВНЫЕ ССЫЛКИ

Программа вступительного испытания предназначена для проведения приема на обучение по программе подготовки научных и научных научно-педагогических кадров в аспирантуре 1.4.4 Физическая химия (химические науки).

2. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ВСТУПИТЕЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ

Цель вступительного испытания: оценка уровня подготовленности поступающих к обучению по программе подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре 1.4.4 Физическая химия (химические науки).

К освоению программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре в аспирантуре допускаются лица, имеющие образование не ниже высшего (специалитет или магистратура).

3. СОДЕРЖАНИЕ ВСТУПИТЕЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ

СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛОВ (ТЕМ) ВСТУПИТЕЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ

ОБЩАЯ ХИМИЯ. СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА

Периодический закон и периодическая система Д. И. Менделеева. Типические элементы. Полные и неполные электронные аналоги. Изменение важнейших свойств элементов по группам и периодам периодической системы. Природа химической связи. Ковалентная, ионная, металлическая и ионная связь. Гибридизация атомных электронных орбиталей. Спины электрона. Запрет Паули. Валентность. Потенциалы ионизации. Сродство к электрону, электроотрицательность. Химическая связь с позиций методов молекулярных орбиталей и валентных связей. Квантовые числа. Главное квантовое число. Магнитное квантовое число. Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Стационарное уравнение Шредингера для свободной молекулы. Адиабатическое приближение. Электронное волновое уравнение. Потенциальные кривые и поверхности потенциальной энергии. Равновесные конфигурации молекул. Электронное строение атомов и молекул. Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Правило Гунда. Электронная плотность. Распределение электронной плотности в двухатомных молекулах. Корреляционные орбитальные диаграммы. Пределы применимости одноэлектронного приближения.

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ

Кристаллохимия. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах. Упорядоченные твердые растворы. Кристаллы с неполной упорядоченностью. Атомы и ионы в узлах, междоузлиях и дырки. Нестехиометрические кристаллы. Ионная проводимость. Полупроводники. Проводимость р- и n-типов. 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. Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов. Поверхность Ферми. Различные типы проводимости. Колебания в кристаллах. Понятие о квантовой теории теплоемкости. Вывод уравнения Эйнштейна. Самодиффузия в твердых телах. Аморфные вещества, особенности строения. Особенности стеклообразного состояния. Ликвация. Переход твердого тела к жидкости, плавление. Твердость и текучесть. Понятие о времени релаксации.

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА

Химическая термодинамика. Предмет и задачи термодинамики. Термодинамическая система, контрольная поверхность, среда. Термодинамические переменные и их классификации (внутренние, внешние, интенсивные, экстенсивные, обобщенные силы и обобщенные координаты и т. п.). Термодинамические процессы (обратимые, необратимые,

самопроизвольные, несамопроизвольные). Первый закон термодинамики, его значение. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия, теплоемкость. Закон Гесса. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгофа. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах. Второй закон термодинамики, его значение. Энтропия и ее изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно – Клаузиуса. Различные шкалы температур. Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца. Уравнения Максвелла. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов. Третий закон термодинамики. Расчет абсолютной энтропии по термодинамическим данным. Применение третьего закона к расчету химического равновесия. Статистический смысл 3-го закона.

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.

ХИМИЧЕСКОЕ РАВНОВЕСИЕ

Константа скорости реакции и ее зависимость от температуры. Химическое равновесие. Необратимые и обратимые реакции. Константа химического равновесия. Связь константы химического равновесия со стандартным изменением энергии Гиббса. Смещение химического равновесия. Принцип Ле-Шателье. Уравнение разных порядков. Определение порядка реакции из опытных данных. Понятие о стадиях, лимитирующих скорость. Кинетика обратимых реакций. Теория столкновения. Вывод уравнения для числа двойных столкновений. Тройные столкновения. Влияние температуры на скорость химических реакций. Уравнение Аррениуса. Энергия активации, ее физический смысл. Метод активированного комплекса в химической кинетике. Предэкспоненциальный член по теории активированного комплекса. Свободная энергия и энтропия активации комплекса.

РАСТВОРЫ ЭЛЕКТРОЛИТОВ

Движение ионов в электрическом поле. Скорость и подвижность ионов. Число переноса. Удельная и эквивалентная электропроводность. Вывод уравнения для эквивалентной электропроводности как функции степени диссоциации и подвижности (уравнение Аррениуса). Влияние растворения на электролитическую диссоциацию. Диссоциация слабых электролитов. Энтальпия и энтропия диссоциации. Влияние этих факторов на диссоциацию. Диссоциации сильных электролитов. Понятие о теории Дебая и Хюккеля. Ионная сила. Активность ионов. Расчеты равновесия с учетом активностей. Протонная теория кислот и оснований. Концентрированные растворы. Ионные пары в растворах. Энтальпия и энтропия растворения. Электродвижущие силы (ЭДС). Работа выхода. Механизм возникновения ЭДС в гальванических элементах. Двойной электролитический слой. Термодинамика гальванического элемента. Электродные потенциалы. Обратимые электроды первого и второго рода. Окислительно-восстановительные цепи. Кислородно-водородная цепь. Концентрационные элементы. Топливный элемент.

КАТАЛИЗ

Гомогенный катализ. Кислотно-основной катализ. Металлокомплексный катализ – примеры реакций и механизмы. Гетерогенный катализ. Адсорбция и хемосорбция. Уравнение Лангмюра для монослойной адсорбции. Активированная адсорбция. Неоднородность поверхности. Катализаторы. Промоторы и ингибиторы.

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ТЕХНОЛОГИИ

Физико-химические методы разделения и очистки веществ. Термодинамика экстракции. Коэффициенты распределения, разделения и очистки. Принципы выбора экстрагента и разбавителя. Основы кинетики экстракционных процессов. Ректификация. Сорбционные методы очистки. Емкость и селективность сорбентов и ионитов. Кинетика ионного обмена, лимитирующие стадии. Кристаллизационные методы очистки. Кристаллизация из расплавов, зонная плавка. Особенности получения полупроводниковых материалов.

ПРИМЕРНЫЙ ПЕРЕЧЕНЬ ВОПРОСОВ ВСТУПИТЕЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ

1. Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса. Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды, серы, фосфора и углерода. Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона – Клаузиуса.
2. Первый закон термодинамики, его значение. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия, теплоемкость. Закон Гесса. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры.
3. Химическая связь с позиций методов молекулярных орбиталей и валентных связей. Квантовые числа. Главное квантовое число. Магнитное квантовое число.
4. Термодинамика экстракции. Коэффициенты распределения, разделения и очистки. Принципы выбора экстрагента и разбавителя. Основы кинетики экстракционных процессов.
5. Термодинамика поверхностных явлений. Адсорбция. Изотермы адсорбции Гиббса и Ленгмюра. Полимолекулярная адсорбция. Адсорбционные методы исследования дисперсных систем.
6. Влияние температуры на скорость химических реакций. Уравнение Аррениуса. Энергия активации, ее физический смысл.
7. Металлокомплексный катализ – примеры реакций и механизмы. Гетерогенный катализ. Адсорбция и хемосорбция. Уравнение Ленгмюра для монослойной адсорбции.
8. Симметрия кристаллов. Кристаллографические точечные группы симметрии, типы решеток, сингонии. Понятие о пространственных группах кристаллов. Индексы кристаллографических граней. Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов.
9. Периодический закон и периодическая система Д. И. Менделеева. Типические элементы. Полные и неполные электронные аналоги. Изменение важнейших свойств элементов по группам и периодам периодической системы.
10. Особенности стеклообразного состояния. Ликвация. Переход твердого тела к жидкости, плавление. Твердость и текучесть. Понятие о времени релаксации.
11. Второй закон термодинамики, его значение. Энтропия и ее изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно – Клаузиуса. Различные шкалы температур. Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца.
12. Движение ионов в электрическом поле. Скорость и подвижность ионов. Число переноса. Удельная и эквивалентная электропроводность. Вывод уравнения для эквивалентной электропроводности как функции степени диссоциации и подвижности (уравнение Аррениуса).

Обязательным вопросом в экзаменационном билете является так же собеседование по предполагаемой теме диссертации на соискание ученой степени кандидата наук.

4. ПОРЯДОК ПРОВЕДЕНИЯ И ФОРМА ВСТУПИТЕЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ

Вступительное испытание проводится экзаменационной комиссией, полномочия и порядок деятельности которой определяются локальным нормативным актом ВятГУ.

Вступительное испытание проводится с использованием дистанционных образовательных технологий в электронной информационно-образовательной среде ВятГУ с применением технологии прокторинга, посредством которой осуществляется идентификация личности поступающего; контроль соблюдения поступающим настоящих Правил приема при выполнении им вступительного испытания; фиксация нарушений поступающим настоящих Правил приема при выполнении им вступительного испытания (при наличии).

Для прохождения вступительного испытания **поступающий обязан**:

1. получить инструкцию по прохождению вступительных испытаний с использованием дистанционных образовательных технологий и выполнить предусмотренные инструкцией требования, в том числе дать согласие на обработку персональных данных и подтвердить наличие указанных ниже технических средств для прохождения вступительного испытания;
2. самостоятельно обеспечить себя необходимыми для прохождения вступительного испытания техническими средствами:
 - а) персональный или мобильный компьютер, подключенный к сети Интернет со скоростью доступа не менее 10 Мбит/с;
 - б) браузер (например, Яндекс.Браузер);
 - в) операционная система не ниже Windows 10, MacOS.
 - г) веб-камера, микрофон и наушники или аудиосистема, обеспечивающие получение и передачу видео- и аудиоинформации между поступающим и экзаменационной комиссией, проктором.

Вступительное испытание проводится **с сочетанием устной и письменной формы** и включает два этапа:

1. письменная часть – письменный ответ на билет вступительного испытания в личном кабинете поступающего в электронной информационно-образовательной среде ВятГУ;
2. устная часть – устное собеседование с экзаменационной комиссией в комнате видеоконференцсвязи по билету вступительного испытания в личном кабинете поступающего в электронной информационно-образовательной среде ВятГУ.

Билет вступительного испытания включает **три вопроса**:

1. **два вопроса** по разделу 3 Программы вступительного испытания.
2. **один вопрос** об актуальности и степени разработанности темы диссертации на соискание ученой степени кандидата наук, предполагаемой для выполнения при обучении в аспирантуре.

В процессе устного собеседования поступающему так же могут быть заданы дополнительные, уточняющие вопросы как по билету вступительного испытания, так и по другим вопросам настоящей Программы вступительного испытания.

Доступ поступающих к билетам до начала вступительного испытания закрыт.

На письменную часть испытания поступающему дано **не более 0,5 часа (30 минут)**.

На устную часть испытания поступающему дано **не более 0,5 часа (30 минут)**.

Общая продолжительность испытания не может превышать **1,0 час (60 минут)**.

Контроль соблюдения поступающим Правил приема и настоящей Программы вступительного испытания проводится на протяжении всего времени прохождения

поступающим вступительного испытания, при этом осуществляется видеозапись прохождения поступающим вступительного испытания.

При прохождении вступительного испытания **поступающему запрещается:**

1) использование учебной и справочной литературы, материалов и электронно-вычислительной техники за исключением тех, которые указаны в программах вступительных испытаний;

2) открытие иных окон (страниц, браузеров) в сети Интернет, за исключением окна с заданием вступительного испытания, и поиск любой информации в сети Интернет;

3) использование любых мобильных и компьютерных устройств, за исключением того мобильного или компьютерного устройства, на котором осуществляется прохождение поступающим вступительного испытания;

4) присутствие в помещении, где сдается вступительное испытание, третьих лиц;

5) отсутствие поступающего в пределах обзора веб-камеры при прохождении вступительного испытания и (или) отведение взгляда от экрана мобильного или компьютерного устройства, на котором осуществляется прохождение поступающим вступительного испытания, более чем на 5 секунд;

6) покидание помещения, в котором осуществляется прохождение вступительного испытания до его завершения.

При нарушении поступающим во время проведения вступительного испытания Правил приема, утвержденных ВятГУ, и (или) настоящей программы вступительного испытания уполномоченные должностные лица ВятГУ составляют акт о нарушении и о непрохождении поступающим вступительного испытания без уважительной причины.

Поступающий однократно сдает каждое вступительное испытание. Поступающие, не прошедшие вступительное испытание по уважительной причине (болезнь или иные обстоятельства, подтвержденные документально), допускаются к сдаче вступительного испытания в резервный день.

5. ПОРЯДОК И ШКАЛА ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ВСТУПИТЕЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ

Вступительное испытание оценивается по 100-балльной шкале.

При оценивании применяются следующие критерии (таблица).

Критерии	Баллы
Поступающий демонстрирует сформированные систематические знания предметной области физической химии, а также достаточные умения, навыки и (или) опыт деятельности в указанной области.	90 – 100
Поступающий демонстрирует сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания предметной области физической химии, а также в целом достаточные умения, навыки и (или) опыт деятельности в указанной области, но не всегда способен осуществить их оптимальный выбор и (или) применение.	75 - 89
Поступающий демонстрирует сформированные, но не структурированные знания предметной области физической химии, а также не полные и (или) не достаточные умения, навыки и (или) опыт деятельности в указанной области, затрудняется в их выборе и (или) применении.	60 – 74
Поступающий демонстрирует ограниченные, не структурированные знания предметной области физической химии, а также не обладает минимальные необходимыми для ведения диссертационного исследования умениями, навыками и (или) опытом деятельности в указанной области.	0 – 59

Минимальное количество баллов, подтверждающее успешное прохождение вступительного испытания (далее – минимальное количество баллов), - **60 баллов**.

Поступающие, получившие по результатам вступительного испытания менее 60 баллов и (или) не прошедшие вступительное испытание без уважительной причины (в том числе удаленные с места проведения вступительного испытания), выбывают из конкурса.

Результаты вступительного испытания оформляются протоколом вступительного испытания на каждого поступающего и объявляются на официальном сайте не позднее третьего рабочего дня после проведения вступительного испытания.

6. ПЕРЕЧЕНЬ ЛИТЕРАТУРЫ ДЛЯ ПОДГОТОВКИ К ВСТУПИТЕЛЬНОМУ ИСПЫТАНИЮ

1. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия. М.: Высшая школа, 1999 г., 528 с.
2. Физическая химия / под ред. Краснова К.С.М.: Высшая школа, 1998 г., кн.1 и 2, 512 с. и 319с.
3. Курс физической химии / под ред. Герасимова Я.И.М.: Химия, 1970 г., Т.1, 502 с. и 1973 г., Т.2, 623 с.
4. Эткинс П., де Паула Дж. Физическая химия. М.: Мир, 2007. Т.1. 494 с.
5. Еремин Е.Н. Основы кинетики химических реакций. — М.: Высшая школа, 1976. 541с.
6. Эммануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики. М.: Высшая школа, 1982. 401 с.
7. Дамаскин Б.Б., Петрий О.А., Цирлина Г.А. Электрохимия. М.: Химия. КолосС, 2008. 672 с.
8. Лукомский Ю.Я., Гамбург Ю.Д. Физико-химические основы электрохимии. Долгопрудный: Издат. дом «Интеллект», 2008. — 424 с.
9. 9Байрамов В.М. Основы химической кинетики и катализа. М.: Издательский центр «Академия», 2003. 256 с.
10. Ягодовский В.Д. Статистическая термодинамика в физической химии. М: Бином. Лаборатория знаний, 2005.490 с.
11. Пармон В.Н. Лекции по термодинамике неравновесных процессов для химиков. Новосибирск: Изд-во Новос. уии-та, 2005.289 с.
12. Аносов В.Я., Озерова М.И., Фиалков Ю.А. Основы физико-химического анализа. М.: Наука, 1976 г., 503 с.
13. Новоселова Н.В. Физико-химические методы анализа: курс лекций; Краснояр. гос. аграр. ун-т. – Красноярск, 2009. – 163 с.
14. Дубова Н.М., Гиндуллина Т.М., Сутягина Г.Н., Короткова Е.И. Физико - химические методы анализа: Учебное пособие. Томск: Изд. ТПУ, 1999. – 123.