**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

федеральное государственное автономное образовательное учреждение

высшего образования

**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ**

**ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

УТВЕРЖДАЮ

Директор ИШПР

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ А.С. Боев

«\_\_\_» \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 2024 г.

**ПРОГРАММА кандидатского экзамена**

ПРИЕМ **2024 г.**

ФОРМА ОБУЧЕНИЯ **очная**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **1.4.4. ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ** | | | | |
|  |  | | | |
| Уровень образования | Высшее образование – подготовка кадров высшей квалификации | | | |
| Курс | 2 | | семестр | **4** |
|  |  | | | |
|  |  | | | |
|  | |  | | |
| Заведующий кафедрой - руководитель  отделения на правах кафедры | |  | | Е.И. Короткова |
| Руководитель программы аспирантуры (ПА) | |  | | Е.И. Короткова |

1. г.
2. **Общие положения**

Программа кандидатского экзамена по специальной дисциплине 1.4.4. Физическая химия (далее – кандидатский экзамен) по программе подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (далее – программа аспирантуры) сформирована с учетом освоения аспирантами специальной дисциплины образовательного компонента программы аспирантуры и паспорта научной специальности.

Кандидатский экзамен представляет собой форму оценки степени подготовленности соискателя ученой степени кандидата наук к проведению научных исследований по конкретной научной специальности и отрасли науки, по которой подготавливается или подготовлена диссертация.

На кандидатском экзамене аспирант (соискатель) должен продемонстрировать умение пользоваться знаниями, приобретенными в ходе освоения дисциплин образовательного компонента программы аспирантуры.

Основу программы кандидатского экзамена по специальности 1.4.4. Физическая химия, составили ключевые проблемы современного состояния и прогнозирование развития физической химии.

**Направления исследований по специальности 1.4.4. Физическая химия:**

1. Исследование закономерностей физико-химических процессов в дисперсных металлах, определение структурно-энергетического состояния
2. Оптимизация способов исследования новых наноструктурированных материалов
3. Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений, а также их спектральных характеристик.
4. Определение термодинамических свойств веществ, расчет термодинамических функций простых и сложных систем, в том числе на основе методов статистической термодинамики, изучение термодинамических аспектов фазовых превращений и фазовых переходов.
5. Разработка подходов определения термодинамических характеристик процессов на поверхности, установление закономерностей адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях.
6. Исследование макрокинетики, механизмов сложных химических процессов, физико-химической гидродинамики, растворения и кристаллизации.
7. Определение динамики элементарного акта химических реакций. Механизмы реакции с участием активных частиц.
8. Установление связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями протекания химической реакции.
9. Создание и разработка методов компьютерного моделирования строения и механизмов превращений химических соединений на основе представлений квантовой механики, различных топологических и статистических методов, включая методы машинного обучения, методов молекулярной механики и молекулярной динамики, а также подходов типа структура-свойства.
10. Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, реакционной способности и динамике превращений химических соединений.
11. **Содержание и структура кандидатского экзамена**

**Общие вопросы**

**Основы классической теории химического строения**

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

**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.

**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.

**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.

**Межмолекулярные взаимодействия**

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

**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.

**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 (нематики, смектики, холестерики и др.).

**Поверхность конденсированных фаз**

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

# **Основные понятия и законы термодинамики**

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

**Первый закон термодинамики**

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

**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.

**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**

Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые Γ- 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, теплоёмкости 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**

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 – Энского.

**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 мольные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса – Дюгема.

Функция смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства.

**Гетерогенные системы**

Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса.

Однокомпоненнтные 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**

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.

**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).

**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.

Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты.

**Равновесные электрохимические процессы**

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.

**Неравновесные электрохимические процессы.**

Процессы, приводящие к коррозии металлов. Химическая и электрохимическая коррозия металлов. Прогнозирование коррозии. Примеры расчета термодинамической возможности коррозии. Оценка скорости химической коррозии Методы исследования коррозионных процессов. Электрохимическая коррозия. Коррозионные системы. Поляризация. Установление типа поляризации. Контролирующий фактор коррозии Методы защиты от коррозии.

**Основные понятия химической кинетики.**

Простые и сложные реакции, молекулярность и скорость простой реакции. Основной постулат химической кинетики. Способы определения скорости реакции. Кинетические кривые. Кинетические уравнения. Константа скорости и порядок реакции. Реакции переменного порядка.

**Феноменологическая кинетика сложных химических реакций.**

Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций. Квазистационарное приближение. Метод Боденштейна – 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.

**Макрокинетика.**

Роль диффузии в кинетике гетерогенных реакций. Кинетика гетерогенных каталитических реакций. Различные режимы протекания реакций (кинетическая и внешняя кинетическая области, области внешней и внутренней диффузии).

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

Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации. Термический и нетермические пути активации молекул. Обмен энергией (поступательной, вращательной и колебательной) при столкновениях молекул. Время релаксации в молекулярных системах.

Теория активных столкновений. Сечение химических реакций. Формула Траутца – Льюиса. Расчет предэкспоненциального множителя по молекулярным постоянным. Стерический фактор.

Теория переходного состояния (активированного комплекса). Поверхность потенциальной энергии. Путь и координата реакции. Статистический расчет константы скорости. Энергия и энтропия активации. Использование молекулярных постоянных при расчете константы скорости.

**Различные типы химических реакций.**

Мономолекулярные реакции в газах, схема Линдемана – Христиансена. Теория РРКМ. Бимолекулярные и тримолекулярные реакции, зависимость предэкспоненциального множителя от температуры.

Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц. Клеточный эффект и сольватация.

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

**Электрохимические реакции.**

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

Электрокапллярные 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.

**Классификация каталитических реакций и катализаторов**

Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия.

**Гомогенный катализ**

Кислотно-основной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гаммета. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Брёнстеда. Корреляционные уравнения для энергий активации и теплот реакций. Специфический и общий основной катализ. Нуклеофильный и электрофильный катализ. Катализ металлокомплексными соединениями. Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы.

**Ферментативный катализ**

Адсорбционные и каталитические центры ферментов. Активность и субстратная селективность ферментов. Коферменты. Механизмы ферментативного катализа.

**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.

**Дополнительная часть программы кандидатского экзамена,**

**включающая региональную и вузовскую компоненты**

Специальные дополнительные требования к кандидатскому экзамену формируется аспиранту (соискателю) научным руководителем в зависимости от выбранного направления научных исследований, содержание которых изложено ниже.

1. **Разработка методов компьютерного моделирования в физической химии**

Основы математического моделирования. Понятие математического моделирования. Классификация моделей. Требования к моделям. Преимущества и недостатки моделирования. Применение моделирования строения и механизмов превращений химических соединений на основе представлений квантовой механики. Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, реакционной способности и динамике превращений химических соединений.

1. **Основы анализа и обработки адсорбционных данных**

Характеристики высокодисперсных и пористых материалов. Связь формы изотермы с механизмом адсорбции. Экспериментальные методы измерения величин адсорбции (статические, динамические). Уравнения и модели физической адсорбции газов и паров на твёрдых телах. Адсорбция на высокодисперсных непористых и макропористых материалах. Адсорбция на микропористых материалах. Теория объёмного заполнения микропор Дубинина. Определение удельной поверхности твёрдых тел.

1. **Методы определения строения молекул**

Физические основы электронного парамагнитного резонанса. Тонкая структура спектров ЭПР. Электрон – электронное взаимодействие. Сверхтонкая структура спектров ЭПР. Спектры ядерного магнитного резонанса. Химический сдвиг. Спин-спиновое расщепление. Интегральные сигналы в ЯМР-спектрах. Анализ ЯМР-спектров высокого разрешения. Влияние динамических процессов на химические сдвиги.

1. **Методические указания по процедуре проведения**

**и оценивания кандидатского экзамена**

**Условия допуска к сдаче кандидатского экзамена**

К кандидатскому экзамену допускаются:

* аспиранты, полностью освоившие программу специальной дисциплины и сдавшие зачет, предусмотренный учебным планом на предыдущем этапе обучения.
* соискатели, прикрепленные к ТПУ для сдачи кандидатских экзаменов, перед экзаменом по специальной дисциплине обязаны пройти собеседование с ведущими специалистами профильного ОХИ ИШПР, на базе которой ведется подготовка аспирантов.

В рамках подготовки к кандидатскому экзамену по специальности 1.4.4. Физическая химия аспирант (соискатель) представляет реферат по тематике своего диссертационного исследования. Тема реферата должна быть согласована с научным руководителем диссертации. Проверку подготовленного реферата проводит член экзаменационной комиссии. При наличии оценки «зачтено» за реферат аспирант допускается к сдаче кандидатского экзамена.

*Требования к оформлению*. Реферат выполняется на листах бумаги формата А4. Текст печатается на компьютере 14 шрифтом. Пробел между строками – 1,5 интервала. При написании текста необходимо соблюдать поля: левое - 25÷30 мм, правое – 10÷15 мм, верхнее - 20 мм, нижнее - 20 мм. Все страницы реферата нумеруются и брошюруются. Объем работы должен составлять не менее 1-го авторского листа (не менее 24 стр.). *Оригинальность текста реферата* должна составлять 95%.

*Структура реферата включает* титульный лист, лист рецензии, содержание, введение, основную часть, заключение, список использованной литературы.

*Титульный лист* является первым листом реферата и заполняется по образцу.

*Содержание* включает наименование глав, разделов, параграфов с указанием номера страницы, с которой они начинаются. Во *введении* раскрывается значение выбранной темы, степень ее исследованности, цель и задачи работы, формулируются основные положения темы и структура работы. Текст *основной* *части* делится на главы, разделы или параграфы, здесь излагается содержание работы. В основной части целесообразно выделение 2-3 вопросов, отражающих разные аспекты темы. В реферате важно привести различные точки зрения на проблему и дать им оценку. В *заключении* подводятся итоги рассмотрения темы. Приветствуется определение автором перспективных направлений по изучению проблемы.

Страницы реферата нумеруются арабскими цифрами, соблюдается сквозная нумерация по всему тексту. Номер ставится внизу страницы по центру. Каждая глава (раздел) должна начинаться с новой страницы. *Ссылки* на источники, цитаты в тексте в квадратных скобках. *Список использованной литературы* дается в алфавитном порядке и должен содержать не менее 15 источников, из них не менее 50% последних пяти лет, из которых не менее половины последних трех лет.

**Проведение кандидатского экзамена**

На кандидатском экзамене экзаменуемый должен продемонстрировать совокупность имеющихся знаний по специальной дисциплине.

Прием кандидатских экзаменов осуществляется очно и в устной форме в комиссии, утвержденной приказом ректора, в составе которой должно участвовать не менее 3-х членов. В случае особых обстоятельств допускается прием кандидатского экзамена в режиме онлайн.

Экзаменационный билет включает в себя 3 вопроса.

Первые два вопроса - это вопросы основной части данной Программы, которые соответствуют паспорту научной по специальности 1.4.4. Физическая химия, третий вопрос должен соответствовать проблематике научной деятельности аспиранта (соискателя).

Ответы на вопросы выполняются в письменном виде в форме тезисов. Устный ответ осуществляется в виде самостоятельного изложения материала на основе письменных тезисов. После устного ответа члены экзаменационной комиссии вправе задать отвечающему уточняющие вопросы по ответам. При необходимости задаются дополнительные вопросы по различным темам специальной дисциплины. Результат сдачи заносится в журнал регистрации, который хранится в отделении / НОЦ. Протоколы сдачи экзаменов с подписью всех членов комиссии сдаются в отдел аспирантуры и докторантуры.

Критерии оценки ответа на кандидатском экзамене:

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **% выполнения заданий**  **экзамена** | **Экзамен, балл** | **Соответствие**  **традиционной оценке** | **Определение оценки** |
| 90%÷100% | 18 ÷ 20 | «Отлично» | Отличное понимание предмета, всесторонние знания, отличные умения и владение опытом практической деятельности, необходимые результаты обучения сформированы, их качество оценено количеством баллов, близким к максимальному |
| 70% - 89% | 14 ÷ 17 | «Хорошо» | Достаточно полное понимание предмета, хорошие знания, умения и опыт практической деятельности, необходимые результаты обучения сформированы, качество ни одного из них не оценено минимальным количеством баллов |
| 55% - 69% | 11 ÷ 13 | «Удовл.» | Приемлемое понимание предмета, удовлетворительные знания, умения и опыт практической деятельности, необходимые результаты обучения сформированы, качество некоторых из них оценено минимальным количеством баллов |
| 0% - 54% | 0 ÷ 10 | «Неудовл.» | Результаты обучения не соответствуют минимально достаточным требованиям |

1. **Рекомендуемая литература**

**Основная литература**

1. Свиридов, В. В. Физическая химия: учебное пособие для вузов / В. В. Свиридов, А. В. Свиридов. — 2-е изд., стер. — Санкт-Петербург: Лань, 2022. — 600 с. — ISBN 978-5-8114-9174-2. — Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/187778> (дата обращения: 27.08.2024). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
2. Казин, В. Н.  Физическая химия: учебное пособие для вузов / В. Н. Казин, Е. М. Плисс, А. И. Русаков. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва: Издательство Юрайт, 2023. — 182 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-11119-4. — Текст: электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/517510> (дата обращения: 27.08.2024).
3. Борщевский, А. Я. Физическая химия: учебник: в 2 томах. Том 2. Статистическая термодинамика / А.Я. Борщевский. — Москва: ИНФРА-М, 2023. — 383 с. + Доп. материалы [Электронный ресурс]. — (Высшее образование: Бакалавриат). — DOI 10.12737/20864. - ISBN 978-5-16-011788-1. - Текст: электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1914144> (дата обращения: 27.08.2024). – Режим доступа: по подписке.
4. Камышов, В. М. Строение вещества: учебное пособие / В. М. Камышов, Е. Г. Мирошникова, В. П. Татауров. — 3-е изд., стер. — Санкт-Петербург: Лань, 2022. — 236 с. — ISBN 978-5-8114-2313-2. — Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/212855> (дата обращения: 30.08.2024). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
5. Термодинамика и кинетика сорбционного концентрирования: учебно-методическое пособие / составители Н. А. Колпакова, Т. С. Минакова. — Томск: ТПУ, 2021 — Часть 1 — 2021. — 229 с. — ISBN 978-5-4387-1019-6. — Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/246314> (дата обращения: 30.08.2024). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
6. Бадаев, Ф. З.  Химическая кинетика: учебник и практикум для вузов / Ф. З. Бадаев. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва: Издательство Юрайт, 2023. — 181 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-11567-3. — Текст: электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/518348> (дата обращения: 30.08.2024).
7. Бокштейн, Б. С. Физическая химия: термодинамика и кинетика: учебник / Б. С. Бокштейн, М. И. Менделев, Ю. В. Похвиснев. - Москва: Изд. Дом МИСиС, 2012. - 258 с. - ISBN 978-5-87623-619-7. - Текст: электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1222892> (дата обращения: 03.09.2024). – Режим доступа: по подписке.
8. Булидорова, Г. В. Фазовые равновесия в многокомпонентных системах: учебное пособие / Г. В. Булидорова. — Казань: КНИТУ, 2014. — 168 с. — ISBN 978-5-7882-1549-5. — Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/73464> (дата обращения: 03.09.2024). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
9. Буданов, В. В. Химическая кинетика: учебное пособие / В. В. Буданов, Т. Н. Ломова, В. В. Рыбкин. — Санкт-Петербург: Лань, 2022. — 288 с. — ISBN 978-5-8114-1542-7. — Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/211475> (дата обращения: 03.09.2024). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

**Дополнительная литература**

1. Тимакова, Е. В. Физическая химия. Электрохимические системы: учебное пособие / Е. В. Тимакова, А. А. Казакова. - Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2020. - 116 с. - ISBN 978-5-7782-4237-1. - Текст: электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1869091> (дата обращения: 05.09.2024). – Режим доступа: по подписке.
2. Андреев, Л. А. Физическая химия: Строение вещества: Метод, указания / Андреев Л. А., Новикова Е. А., Малютина Г. Л., Новиков А. В. - Москва: МИСиС, 2002. - 21 с. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. - URL: <https://www.studentlibrary.ru/book/Misis_274.html> (дата обращения: 05.09.2024). - Режим доступа: по подписке.
3. Дерябин, В. А.  Физическая химия дисперсных систем: учебное пособие для вузов / В. А. Дерябин, Е. П. Фарафонтова; под научной редакцией Е. А. Кулешова. — Москва: Издательство Юрайт, 2022. — 86 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-05375-3. — Текст: электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/493408> (дата обращения: 05.09.2024).
4. Булидорова, Г. В. Растворы электролитов: характеристики, свойства, законы: учебно-методическое пособие / Булидорова Г. В. - Казань: Издательство КНИТУ, 2017. - 84 с. - ISBN 978-5-7882-2155-7. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. - URL: <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785788221557.html> (дата обращения: 05.09.2024). - Режим доступа: по подписке.
5. Фазовые равновесия в двухкомпонентных системах: учебное пособие / Е. Б. Ильина, Н. М. Хохлачёва, Н. Ф. Истомина, Е. Е. Мареичева; под ред. П. Г. Бабаевского. — Москва: ИНФРА-М, 2019. — 130 с. — (Высшее образование: Бакалавриат). - ISBN 978-5-16-011821-5. - Текст: электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1009303> (дата обращения: 05.09.2024). – Режим доступа: по подписке.
6. Булидорова, Г. В. Кинетика гетерогенных и каталитических реакций: учебное пособие / Булидорова Г. В. - Казань: Издательство КНИТУ, 2017. - 111 с. - ISBN 978-5-7882-2240-0. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. - URL: <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785788222400.html> (дата обращения: 20.08.2024). - Режим доступа: по подписке.
7. Селиванова, Н. М. Химическая кинетика: практикум / Н. М. Селиванова, Г. В. Булидорова, Ю. Г. Галяметдинов. - Казань: КНИТУ, 2020. - 104 с. - ISBN 978-5-7882-2827-3. - Текст: электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1904863> (дата обращения: 20.08.2024). – Режим доступа: по подписке.
8. Колпакова, Н. А. Сборник задач по химической кинетике: учебное пособие / Н. А. Колпакова, С. В. Романенко, В. А. Колпаков. — 3-е изд., стер. — Санкт-Петербург: Лань, 2022. — 280 с. — ISBN 978-5-8114-2394-1. — Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/212864> (дата обращения: 20.08.2024). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
9. Колпакова, Н. А. Общие вопросы электрохимического анализа: учебное пособие / Н. А. Колпакова. — Томск: ТПУ, 2013. — 159 с. — Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/45140> (дата обращения: 28.08.2024). — Режим доступа: для авториз. пользователей.