

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования университет «Дубна»
(государственный университет «Дубна»)

Проректор по учебно-
методической работе

А.С. Деникин

2022г



Программа вступительного экзамена в аспирантуру

по научной специальности
1.4.4 Физическая химия

Дубна, 2022

Авторы программы:

Моржухина С.В., кандидат химических наук, доцент



(подпись)

Заведующий кафедрой



к.х.н., доцент С.В. Моржухина

1. Аннотация

Для сдачи вступительного экзамена по научной специальности 1.4.4 «Физическая химия» поступающие должны:

- письменно и устно представить реферат с анализом той области, с которой будет связана научная работа над кандидатской диссертацией;
- уметь кратко изложить содержание научной работы над кандидатской диссертацией;
- знать материал, предусмотренный общей частью программы.

Тематическими разделами программы вступительного экзамена являются:

1. Вопросы содержательной части программы вступительного экзамена;
2. Специальные вопросы физической химии, связанные с узкой областью, с которой будет связана научная работа над кандидатской диссертацией.

2. Содержание программы

1. Термодинамический метод, термодинамические переменные и их классификации. Постулат равновесия. Функции состояния и функции пути. Теплота и работа различных процессов. Абсолютная температура. Первый закон термодинамики. Его формулировка и следствия. Внутренняя энергия и ее свойства. Энтальпия. Вычисление внутренней энергии и энтальпии из опытных данных

2. Второй закон термодинамики. Его формулировки. Обоснование второго закона термодинамики (методы Карно-Клаузиуса, Каратеодори). Энтропия, как функция состояния. Изменение энтропии при необратимых процессах. Неравенство Клаузиуса, «потерянная работа» и «некомпенсированная теплота». Математический аппарат термодинамики. Фундаментальное уравнение Гиббса. Внутренняя энергия, как однородная функция объема, энтропии и числа молей. Уравнение Гиббса-Дюгема. Термодинамические потенциалы. Соотношения Максвелла и их использование при расчетах энергии, энтальпии и энтропии. Уравнение Гиббса-Гельмгольца, его различные формы и применение в термодинамике.

3. Химические равновесия в закрытых системах. Условие химического равновесия. Сродство химической реакции. Скорость производства (производство) энтропии при химической реакции. Различные формы записи констант равновесия и связь между ними. Закон действующих масс и его термодинамический вывод.

4. Адсорбция и ее определения. Изотерма, изобара и изостера адсорбции. Изотерма Лэнгмюра, ее анализ и области применимости. Полимолекулярная адсорбция. Уравнение БЭТ и его применение для определения поверхности твердых тел.

5. Основные понятия и постулаты формальной кинетики. Прямая и обратная кинетические задачи. Параметры кинетических уравнений. Молекулярность и порядок реакции. Методы определения порядка реакции. Реакции переменного порядка (привести примеры).

6. Уравнение Аррениуса. Способы определения опытной энергии активации и ее связь с энергиями активации элементарных процессов. Теория активированного комплекса и статический вывод основного уравнения. Взаимосвязь опытной и истинной энергии активации.

7. Кинетические характеристики элементарных процессов фотохимии. Принцип Франка-Кондона. Физические и химические свойства молекул в электронно-возбужденном состоянии. Законы фотохимии. Квантовый выход. "Двухквантовые процессы". Кинетическая схема Штерна-Фольмера.
8. Теория сильных электролитов Дебая-Хюккеля: вывод формулы для потенциала ионной атмосферы в растворе 1,1-валентного электролита. Первое и второе приближения теории Дебая-Хюккеля для расчета среднего ионного коэффициента активности.
9. Удельная и эквивалентная электропроводности электролитов. Подвижности отдельных ионов. Числа переноса. Зависимость эквивалентной электропроводности от температуры и концентрации раствора. Уравнение Онзагера.
10. Электрохимический потенциал. Условия равновесия на границе электрода с раствором и в электрохимической цепи. Относительные и стандартные электродные потенциалы. Классификация электродов и электрохимических цепей.
11. Лимитирующие стадии в электрохимических реакциях. Поляризация электрода и ток обмена. Диффузионная кинетика электродных процессов.
12. Физико-химические основы электрохимических методов исследования: потенциометрия, амперометрия, циклическая вольтамперометрия. Электрохромные системы.
13. Физико-химические особенности наноразмерных систем. Уравнение Гиббса-Гельмгольца, его различные формы и его применение к наносистемам. Мерность нанообъектов. Поверхностные слои. Наночастицы и квантовые точки.
14. Влияние размерного фактора на структуру, реакционную способность и свойства наноматериалов. Зависимости между поверхностными и объемными свойствами наносистем. Методы получения наноразмерных материалов.
15. Физико-химические закономерности формирования наноструктурных материалов. Основные физико-химические закономерности и способы регулирования процессов зародышеобразования и роста наночастиц.
16. Квантово-химические эффекты наноразмерных систем на примере квантовых точек. Влияние растворителей и полимерных матриц на оптические свойства квантовых точек.

2. Процедура проведения вступительного экзамена

Вступительный экзамен содержит компьютерное тестирование в системе СДО Moodle chemistry. Максимальная сумма баллов 100, проходной балл 60.

С лицами, успешно прошедшими тестирование, проводится устное собеседование. Время тестирования составляет не более 40 минут. По истечении отведенного времени абитуриент приглашается для сдачи экзамена в форме собеседования, который продолжается не более 30 минут.

Дополнительные материалы и оборудование на вступительном экзамене не используются.

3. Критерии выставления оценок по результатам сдачи вступительного экзамена

Ответы на вопросы билета вступительного экзамена оцениваются по четырехбалльной системе «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». Отказ от ответа на один вопрос билета является, как правило, основанием для выставления неудовлетворительной оценки за вступительный экзамен в целом.

Оценка	Характеристики ответа
Отлично	Ответ полный, логичный, конкретный, без замечаний, продемонстрированы глубокие знания химической проблематики и терминологии.
Хорошо	Ответ полный, логичный, конкретный, присутствуют незначительные замечания в отношении знания химической проблематики и терминологии.
Удовлетворительно	Ответ неполный, отсутствует логичность повествования, при ответе упущены отдельные основные понятия; в ответе содержатся ошибочные положения.
Неудовлетворительно	Ответ на поставленный вопрос не дан.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Ярославцев А.Б.** Основы физической химии: Учеб.пособие для вузов / - 2-е изд. - М.: Научный мир, 2000. - 232с.: ил. - Предм.указ.:с.226. - ISBN 5-189176-091-6.
2. **Основы физической химии. Теория и задачи:** Учебное пособие для вузов / - М.: Экзамен, 2005. - 480с.: ил. - - Лит.:с.486.-Предм.указ.:с.471. - ISBN 5-472-00834-4.
3. **Задачи по химической термодинамике:** Учебное пособие для вузов (гриф) / - 2-изд.,испр. - М.: Химия: КолосС, 2004. - 120с.: ил. -. - Библиогр.список:с.119. - ISBN 5-98109-002-2. - ISBN 5-9532-0240-
4. Пригожин И. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур / Пригожин И., Кондепуди Д. - : Мир, 2009. - 10 экз. заказано. - ISBN 5-03-003538-9
5. **Байрамов В.М.** Основы химической кинетики и катализа: Учебное пособие для вузов (гриф) - М.: Академия, 2003. - 256с.: ил. - - Лит.:с.242.-Предм.указ.:с.244. - ISBN 5-7695-1297-0.
6. **Байрамов В.М.** Химическая кинетика и катализ: Примеры и задачи с решениями: Учебное пособие для вузов (гриф) / - : Академия, М. - 256с.: ил. - - Прил.:с.316.-Список лит.:с.318. - ISBN 5-7695-1293-8

7. **Романовский Б.В.** Основы химической кинетики: Учебник (гриф) / - М.: Экзамен, 2006. - 415с.: ил. - (Учебник для вузов). - Лит.:с.414.
8. **Дамаскин Б.Б.** Электрохимия : Учебник для вузов (гриф) - 2-е изд.,испр.и перераб. - М.: КолосС: Химия, 2006. - 672с.: ил.. - Лит.:с.659.-Предм.указ.:с.666. - ISBN 5-9532-0295-4
9. **Жариков В.А.** Основы физической геохимии / Жариков В.А. - М.: Издательство Московского университета; : Наука, 2005. - 656с. - ISBN 5-211-04849-0.
10. **Дорофеева В.А.** Эволюция ранней солнечной системы: Космохимические и физические аспекты / Дорофеева Вера Алексеевна, Макалкин Андрей Борисович. - М.: Едиториал УРСС, 2004. - 264с.: ил. - Глоссарий:с.222.-Лит.:с.231. - ISBN 5-354-00654-6.
11. **Шапкин А.И.** Термодинамические модели в космохимии и планетологии / - : Едиториал УРСС, 2004. - 336с.. - ISBN 5-354-00345-8.
12. **Трифонов К.И.** Физико-химические процессы в техносфере: Учебник (гриф) / - : ИНФРА-М: Форум, 2007. - 240с. - (Высшее образование). - ISBN 5-91134-081-X.
13. **Уманский С.Я.** Теория элементарных химических реакций / Уманский С.Я. - : Интеллект, 2009. - 5 экз. заказано. - ISBN 978-5-91559-077-8.
14. **Бейдер Р.** Атомы в молекулах: Квантовая теория / Бейдер Ричард; Пер.с англ. Е.С.Апостоловой и др.; Под ред. М.Ю.Антипина, В.Г.Цирельсона. - М.: Мир, 2001. - 532с.: ил. - (Теоретические основы химии). - Прил.:с.517.-Предм.указ.:с.523. - ISBN 0-19-855685-1
15. **Франк-Каменецкий Д.А.** Основы макрокинетики. Диффузия и теплопередача в химической кинетике / Франк-Каменецкий Д.А. - 4-е изд. - : Интеллект, 2008. - 5 экз. заказано. - ISBN 978-5-91559-004-4.
16. **Чоркендорф И.** Современный катализ и химическая кинетика: Пер.с англ. / Чоркендорф И., Наймантсведрайт Х. - : Интеллект, 2009. - 5 экз. заказано. - ISBN 978-5-91559-044-0
17. **Карапетьянц М.Х.** Общая и неорганическая химия: Учебник для вузов . - 3-е изд.,стер. - М.: Химия, 1994. - 592с.: ил. - (Для высшей школы). - Предм.указ.:с.581.- Прил. - ISBN 5-7245-1002-2.
18. **Суворов А.В.** Общая химия: Учебник для вузов (гриф) / Суворов А.В., Никольский А.Б. - 5-е изд.,испр. - : Химиздат, 2007. - 624с. - ISBN 5-93808-129-7.
19. **Ахметов Н.С.** Общая и неорганическая химия / Ахметов Наиль Сибгатович. - 3-е изд.,перераб.и доп. - М.: Высшая школа, 1998. - 744с.: ил. - Список лит.:с.727.
20. **Суздалев И.П.** Нанотехнология: Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. Изд.2, испр.

Периодические издания

1. Вестник Московского университета. Серия 2, Химия : научный журнал / учредитель: Моск. гос. ун-т им. М.В. Ломоносова, фак-т химии. - М. : МГУ. - Журнал, основан в ноябре 1946 года. - Выходит отдельной серией с 1960 года - Доступ к архиву статей с 1998 г. на сайте журнала: <http://www.chem.msu.ru/rus/vmgu/>
2. Геохимия / учредитель: РАН, отделение геологии, геофизики, геохимии и горных наук РАН [и др.]. - М. : МАИК НАУКА. - Журнал, основан в январе 1956 года академиком А.П. Виноградовым. - Содержание выпусков и аннотации статей на английском языке с 1996 г. на сайте издательства: <http://www.maik.rssi.ru/cgi-perl/search.pl?lang=rus>
3. Журнал аналитической химии / учредитель: РАН, отделение физикохимии и технологии неорганических материалов и Институт геохимии и аналитической химии. - М. : МАИК Наука . - Журнал, основан в 1946 году. - Содержание выпусков с 1999 г. на сайте журнала: <http://www.zhakh.ru/Lists/Content/view.aspx>

4. Журнал неорганической химии / учредитель: РАН, отд-ние физикохимии и технологии неорганических материалов. - М. : МАИК НАУКА. - Журнал, основан в январе 1956 года. - Содержание выпусков и аннотации статей с 1996 г. на английском языке на сайте издательства: <http://www.maik.rssi.ru/cgi-perl/search.pl?lang=rus>

Электронно-библиотечные системы (ЭБС) и БД

1. Электронная библиотека диссертаций (ЭБД) РГБ: <http://diss.rsl.ru/>
2. Реферативная и библиографическая БД Web of Science, JCR компании Thomson Reuters: <http://webofknowledge.com>
3. Реферативная и библиографическая БД SCOPUS: <http://www.scopus.com/home.url>
4. Elibrary.ru. Научная электронная библиотека (РУНЭБ)

Профессиональные ресурсы Интернет

Аналитическая химия в России

ХиМиК.ru

Organic Laboratory Химическая полнотекстовая библиотека

Organic Chemistry Portal

Beilstein Journal of Organic Chemistry (BJOC)

Биоорганическая химия

Вестник Московского университета. Сер.2. Химия

Вестник Московской государственной академии тонкой химической технологии им.М.В.Ломоносов

Известия высших учебных заведений. Химия и химическая технология

Конденсированные среды и межфазные границы

Российский химический журнал

Сорбционные и хроматографические процессы

Успехи химии

Физико-химический анализ свойств многокомпонентных систем

Электронная библиотека химического факультета МГУ

Научные поисковые системы

SCIENCE INDEX на основе данных РИНЦ http://elibrary.ru/project_risc.asp

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

Web of Science <http://webofknowledge.com>

[BASE: Bielefeld Academic Search Engine](#)

[HighWire Press + Medline](#)

[Microsoft Academic Search](#)

[ResearchIndex](#)

[SciCentral - путеводитель по научным ресурсам](#)

[Science Research Portal](#)

[Science.gov](#)

[SciGuide](#)

[SciNet — Science search](#)

[Trove](#)

[WorldWideScience.org](#)

Базы периодических электронных изданий

1. Коллекция подписных российских научных журналов на НЭБ
2. Российские открытые научные журналы на платформе eLIBRARY.RU
3. Электронная база данных российских журналов компании East View.
<http://dlib.eastview.com>
4. Springer on eLibrary.Ru

5. World Scientific on eLibrary.Ru
6. Academic Press on eLibrary.Ru
7. Zentralblatt MATH on eLibrary.Ru
8. Журналы издательства Annual Reviews
9. Журналы издательства Nature Publishing Group
- 9.1. Nature
- 9.2. Nanotechnology
- 9.3. Nature Chemistry
- 9.4. Nature Materials
- 9.5 . Nature Physics
10. Журналы издательства Taylor & Francis
11. Журналы издательства Sage Publications
12. журнал «Science» издательства American Association for the Advancement of Science (AAAS).
13. Журналы Американского химического общества (ACS). <http://pubs.acs.org/>
14. Royal Society of Chemistry
15. Архивы научных журналов <http://archive.neicon.ru/xmlui/>
16. Science of Synthesis – Thieme - <https://www.thieme.de/en/thieme-chemistry/home-51399.htm>

Электронно-библиотечные системы (ЭБС)

1. КнигаФонд – www.knigafund.ru
2. Университетская библиотека онлайн – www.biblioclub.ru
3. ZNANIUM – www.znanium.com
4. ЭБС "Лань" <http://e.lanbook.com>

Электронные научные ресурсы

1. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU (НЭБ)
2. База данных POLPRED.com.
3. Коллекция электронных книг издательства Springer eBooks collection

Базы данных компании EBSCO Publishing:

4. INSPEC
1. Academic Search Premier
6. MasterFILE Premier
7. GreenFILE

Библиографические базы данных

1. ИНИОН РАН on Elibrary.ru
2. Всероссийский институт научной и технической информации (ВИНИТИ)
3. Библиографическая база данных Ingenta
4. Служба ИНФОМАГ

Российские библиотеки

1. Российская Государственная Библиотека (РГБ)
2. Российская национальная библиотека (РНБ), г. Санкт-Петербург
3. Библиотека по естественным наукам РАН (БЕН РАН)
4. Государственная публичная научно-техническая библиотека (ГПНТБ)
5. Научно-техническая библиотека ОИЯИ
6. Научная библиотека МГУ им. М. В. Ломоносова
7. Библиотека университета «Дубна»