

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ФГБОУ ВО «УФИМСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ»

ИНСТИТУТ ХИМИИ И ЗАЩИТЫ В ЧРЕЗВЫЧАЙНЫХ СИТУАЦИЯХ

ПРИНЯТО

На заседании Ученого совета

ИХЗЧС

Протокол от «20» февраля 2024 г.

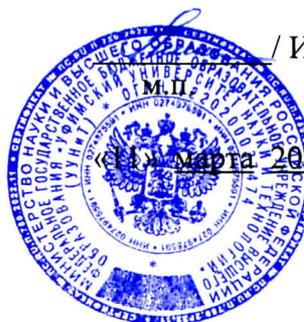
№ 5

И.о.директора  / А.Н. Елизарьев

УТВЕРЖДЕНО

Проректор по образовательной  
деятельности

/ И.А. Макаренко



**ПОДГОТОВКА КАДРОВ ВЫСШЕЙ КВАЛИФИКАЦИИ**

**ПРОГРАММА КАНДИДАТСКОГО ЭКЗАМЕНА  
ПО СПЕЦИАЛЬНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ**

НАУЧНАЯ СПЕЦИАЛЬНОСТЬ

1.4.4. Физическая химия

Отрасль науки:  
«Химические науки»

Уфа – 2024 г.

Разработчик:



/ д.х.н., проф., профессор кафедры физической и химической экологии  
Ю.С. Зимин

Программа кандидатского экзамена по специальной дисциплине по научной специальности  
1.4.4. Физическая химия утверждена на заседании кафедры физической и химической экологии  
(Протокол от «16» февраля 2024 г. № 6).

## 1. Общие положения

1.1. Область науки<sup>1</sup>:

1. Естественные науки

Группа научных специальностей:

1.4. Химические науки

Наименование отрасли науки, по которой присуждаются ученые степени:

Химические науки

Шифр научной специальности:

1.4.4. Физическая химия

1.2. Программа кандидатского экзамена по специальной дисциплине (далее «специальная дисциплина») по научной специальности 1.4.4. Физическая химия разработана в соответствии с:

Федеральным законом от 29.12.2012 г. № 273-ФЗ «Об образовании в Российской Федерации»;

Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 «О порядке присуждения ученых степеней»;

Приказом Минобрнауки России от 28.03.2014 № 247 «Об утверждении Порядка прикрепления лиц для сдачи кандидатских экзаменов, сдачи кандидатских экзаменов и их перечня»;

Приказом Минобрнауки России от 05.08.2021 № 712 «О внесении изменений в некоторые приказы Министерства образования и науки Российской Федерации и Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в сфере высшего образования и науки и признании утратившими силу приказов Министерства образования и науки Российской Федерации от 22 апреля 2013 г. N 296 и от 22 июня 2015 г. N 607»;

Приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 24 февраля 2021 г. № 118 «Об утверждении номенклатуры научных специальностей, по которым присуждаются ученые степени, и внесении изменения в Положение о совете по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук, утвержденное приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 10 ноября 2017 г. № 1093»;

Паспортом научной специальности 1.4.4. Физическая химия;

Уставом УУНиТ;

Приказом УУНиТ от 07.03.2023 № 0527 «О Порядке прикрепления лиц для сдачи кандидатских экзаменов».

1.3. Программа кандидатского экзамена регламентирует цель, задачи, содержание, организацию кандидатского экзамена, порядок работы экзаменационной комиссии, порядок оценки уровня знаний соискателя ученой степени кандидата химических наук, и включает перечень вопросов, выносимых на кандидатский экзамен, рекомендации по подготовке к кандидатскому экзамену, в том числе, перечень литературы и ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для подготовки к кандидатскому экзамену.

1.4. Кандидатские экзамены представляют собой форму оценки степени подготовленности соискателя ученой степени кандидата химических наук (аспиранта/прикрепленного лица) к проведению научных исследований по конкретной научной специальности и отрасли науки, по которой подготавливается или подготовлена диссертация.

## 2. Цель проведения кандидатского экзамена

Целью проведения кандидатского экзамена по специальной дисциплине является оценка степени подготовленности соискателя ученой степени кандидата наук (аспиранта/прикрепленного

---

<sup>1</sup> См. Паспорт научной специальности на сайте ВАК

лица) к проведению научных исследований по научной специальности 1.4.4. Физическая химия и отрасли науки – Химические науки, по которой подготавливается или подготовлена диссертация:

– проверка сформированности умений в области применения химии, использования междисциплинарных установок и общенаучных понятий в решении комплексных задач теории и практики в конкретно научной исследовательской деятельности;

– владение основными химическими категориями и физико-химическими методами на уровне, позволяющем получать качественные результаты при решении теоретических и прикладных задач в области химических дисциплин;

– получение практических навыков аргументации в обосновании научного статуса и актуальности конкретной исследовательской задачи, в работе с внеэмпирическими методами оценки выдвигаемых проблем и гипотез.

Сдача кандидатских экзаменов обязательна для присуждения ученой степени кандидата наук.

### **3. Задачи, решаемые в ходе сдачи кандидатского экзамена**

В ходе сдачи кандидатского экзамена необходимо оценить:

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

– способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области естественных наук.

### **4. Структура и содержание кандидатского экзамена**

4.1. Кандидатский экзамен по специальной дисциплине по научной специальности 1.4.4. Физическая химия проводится в устной форме по билетам (Приложение № 1)<sup>2</sup>.

Экзаменационный билет включает в себя два-три теоретических вопроса и задание по теме диссертационного исследования.

Продолжительность устного ответа на экзамене – 20 минут, время на подготовку к ответу на экзаменационный билет – до 60 минут.

4.2. Комиссия по приему кандидатского экзамена по специальной дисциплине правомочна принимать кандидатский экзамен по специальной дисциплине, если в ее заседании участвуют не менее 3 специалистов, имеющих ученую степень кандидата или доктора наук по научной специальности, соответствующей специальной дисциплине, в том числе 1 доктор наук.

Решение, принятое комиссией, оформляется протоколом по установленной Университетом форме.

4.3. Университет вправе применять дистанционные образовательные технологии при проведении кандидатского экзамена. Особенности проведения кандидатских экзаменов с применением дистанционных образовательных технологий определяются локальным нормативным актом Университета.

При проведении кандидатского экзамена с применением дистанционных образовательных технологий Университет обеспечивает идентификацию личности аспирантов/прикрепленных лиц и контроль соблюдения требований, установленных локальным нормативным актом.

### **5. Перечень тем, вынесенных на кандидатский экзамен**

Тема 1. Основы классической теории химического строения.

Тема 2. Физические основы учения о строении молекул.

---

<sup>2</sup> Вставить пример одного экзаменационного билета.

- Тема 3. Симметрия молекулярных систем.
- Тема 4. Электрические и магнитные свойства.
- Тема 5. Межмолекулярные взаимодействия.
- Тема 6. Основные результаты и закономерности в строении молекул.
- Тема 7. Строение конденсированных фаз.
- Тема 8. Поверхность конденсированных фаз.
- Тема 9. Основные понятия и законы термодинамики.
- Тема 10. Элементы статистической термодинамики.
- Тема 11. Элементы термодинамики необратимых процессов.
- Тема 12. Растворы. Фазовые равновесия.
- Тема 13. Адсорбция и поверхностные явления.
- Тема 14. Электрохимические процессы.
- Тема 15. Химическая кинетика.
- Тема 16. Катализ.

## **6. Перечень документов и материалов, которыми разрешается пользоваться на кандидатском экзамене**

Программа кандидатского экзамена по специальной дисциплине по научной специальности 1.4.4. Физическая химия.

Во время проведения кандидатского экзамена аспирантам/прикрепленным лицам, привлекаемым к его проведению, запрещается иметь при себе и использовать средства связи.

## **7. Перечень вопросов для проведения кандидатского экзамена:**

### **1. Строение вещества**

#### **1.1. Основы классической теории химического строения**

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

#### **1. 2. Физические основы учения о строении молекул**

Механическая модель молекулы. Потенциалы парных взаимодействий. Методы молекулярной механики и молекулярной динамики при анализе строения молекул.

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

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

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

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

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

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

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

Электронная корреляция в атомах и молекулах. Ее 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.

### **1.3. Симметрия молекулярных систем**

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

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

### **1.4. Электрические и магнитные свойства**

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

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

### **1.5. Межмолекулярные взаимодействия**

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

### **1.6. Основные результаты и закономерности в строении молекул**

Строение молекул простых и координационных неорганических соединений. Полиядерные комплексные соединения. Строение основных типов органических и элементоорганических соединений. Соединения включения. Полимеры и биополимеры.

### **1.7. Строение конденсированных фаз**

Структурная классификация конденсированных фаз.

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

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

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

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

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

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

Мицеллообразование и строение мицелл.

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

## **1.8. Поверхность конденсированных фаз**

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

## **2. Химическая термодинамика**

### **2.1. Основные понятия и законы термодинамики**

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

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

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

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

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

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

### **2.2. Элементы статистической термодинамики**

Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые Г- и  $\mu$ -пространства. Эргодическая гипотеза. Термодинамическая вероятность и ее связь с энтропией. Распределение Максвелла – Больцмана.

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

Каноническая функция распределения Гиббса. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция. Статистические выражения для основных термодинамических функций. Молекулярная сумма по состояниям и сумма по состояниям макроскопической системы. Поступательная, вращательная, электронная и колебательная суммы по состояниям. Статистический расчет энтропии. Постулат Планка и абсолютная энтропия.

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.

### **2.3. Элементы термодинамики необратимых процессов**

Основные положения термодинамики неравновесных процессов. Локальное равновесие. Флуктуации. Функция диссипации. Потоки и силы. Скорость производства энтропии. Зависимость

скорости производства энтропии от обобщенных потоков и сил. Соотношения взаимности Онсагера. Стационарное состояние системы и теорема Пригожина.

Термодиффузия и ее описание в неравновесной термодинамике. Уравнение Чепмена – Энского.

#### **2.4. Растворы. Фазовые равновесия**

*Различные типы растворов.* Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение.

Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонент растворов. Симметричная и несимметричная системы отсчета.

Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия. Зонная плавка. Осмотические явления. Парциальные молярные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса – Дюгема.

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

*Гетерогенные системы.* Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса.

Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды, серы, фосфора и углерода. Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона – Клаузиуса.

Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Равновесие жидкость – пар в двухкомпонентных системах. Законы Гиббса – Коновалова. Азеотропные смеси.

Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста.

Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.

#### **2.5. Адсорбция и поверхностные явления**

*Адсорбция.* Адсорбент, адсорбат. Виды адсорбции. Структура поверхности и пористость адсорбента. Локализованная и делокализованная адсорбция. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Динамический характер адсорбционного равновесия.

Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Лэнгмюра. Адсорбция из растворов. Уравнение Брунауэра – Эмета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента.

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

*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).

#### **2.6. Электрохимические процессы**

Растворы электролитов. Ион-дипольное взаимодействие как основной процесс, определяющий устойчивость растворов электролитов. Коэффициенты активности в растворах электролитов. Средняя активность и средний коэффициент активности, их связь с активностью отдельных ионов. Основные положения теории Дебая – Хюккеля. Потенциал ионной атмосферы.

Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и в электрохимической цепи. Термодинамика гальванического элемента. Электродвижущая сила, ее выражение через энергию Гиббса реакции в элементе. Уравнения Нернста и Гиббса – Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи. Понятие электродного потенциала. Определение коэффициентов активности на основе измерений ЭДС гальванического элемента.

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

### 3. Кинетика химических реакций

#### 3.1. Химическая кинетика

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

*Феноменологическая кинетика* сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций. Квазистационарное приближение. Метод Боденштейна – Темкина. Кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса – Ментен.

Цепные реакции. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций. Кинетические особенности разветвленных цепных реакций. Предельные явления в разветвленных цепных реакциях. Полуостров воспламенения, период индукции. Тепловой взрыв.

Реакции в потоке. Реакции идеального вытеснения и идеального смешения. Колебательные реакции.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Электрокапиллярные 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.

#### 3.2. Катализ

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

*Гомогенный катализ.* Кислотно-основной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гаммета. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Бренстеда. Корреляционные уравнения для энергий активации и теплот реакций. Специфический и общий основной катализ. Нуклеофильный и электрофильный катализ.

Катализ металлокомплексными соединениями. Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы.

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

*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.

## **8. Порядок оценки уровня знаний соискателя ученой степени кандидата наук**

8.1. Оценка уровня знаний соискателя ученой степени кандидата наук определяется экзаменационными комиссиями по пятибалльной системе: «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

8.2. При оценке знаний и уровня подготовки соискателя ученой степени кандидата наук, определяется:

- уровень освоения материала, предусмотренного программой кандидатского экзамена;
- умение использовать теоретические знания при выполнении практических задач;
- обоснованность, четкость, краткость изложения ответа.

8.3. Общими критериями, определяющими оценку уровня знаний соискателя ученой степени кандидата наук, являются:

– для оценки «отлично»: наличие глубоких и исчерпывающих знаний в объеме пройденного программного материала, правильные и уверенные действия по применению полученных знаний на практике, грамотное и логически стройное изложение материала при ответе, знание дополнительно рекомендованной литературы;

– для оценки «хорошо»: наличие твердых и достаточно полных знаний программного материала, незначительные ошибки при освещении заданных вопросов, правильные действия по применению знаний на практике, четкое изложение материала;

– для оценки «удовлетворительно»: наличие твердых знаний пройденного материала, изложение ответов с ошибками, уверенно исправляемыми после дополнительных вопросов, необходимость наводящих вопросов, правильные действия по применению знаний на практике;

– для оценки «неудовлетворительно»: наличие грубых ошибок в ответе, непонимание сущности излагаемого вопроса, неумение применять знания на практике, неуверенность и неточность ответов на дополнительные и наводящие вопросы.

## **9. Методические указания по подготовке к сдаче кандидатского экзамена**

При подготовке к кандидатскому экзамену рекомендуется:

Внимательно прочесть источники в списке рекомендуемой литературы и проанализировать информацию.

Сделать выписки (конспект) необходимой информации в соответствии с темами и экзаменационными вопросами.

Систематизировать и классифицировать полученные данные по тематическим разделам и экзаменационным вопросам.

Составить рабочие записи – ключевые опорные пункты в соответствии с логикой ответа на экзаменационные вопросы.

Подобрать необходимую иллюстративную информацию по содержанию ответа на экзаменационные вопросы.

В ходе подготовки к выполнению практического задания обучающийся анализирует результаты диссертационного исследования.

## **10. Перечень рекомендуемой литературы и ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»**

### **а) основная литература:**

1. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия: учебник / Н. Ф. Степанов. – М.: Мир, Изд-во МГУ, 2007. – 519 с. <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+4484+default+3+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>

2. Минкин, В. И. Теория строения молекул / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. – Изд. 2-е, перераб. и доп. – Ростов-на-Дону, 1997. – 560 с. <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+364+default+4+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>

3. Стромберг, А. Г. Физическая химия / А. Г. Стромберг, Д. П. Семченко; под ред. А. Г. Стромберга. – 6-е изд., стереотип. – М.: Высшая школа, 2006. – 527 с. <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+4176+default+1+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>

4. Ягодовский, В. Д. . Статистическая термодинамика в физической химии / В. Д. Ягодовский. – 2-е изд., испр. и доп. – М.: БИНОМ, 2005. – 495 с. <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+4176+default+3+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>

5. Буданов, Вадим Васильевич. Химическая кинетика : учеб. пособие / В. В. Буданов, Т. Н. Ломова, В. В. Рыбкин. — Санкт-Петербург : Лань, 2014. — 288 с. <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+4176+default+20+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>

6. Чоркендорф, И. Современный катализ и химическая кинетика / И. Чоркендорф, Х. Наймантсведрайт; пер. с англ. В. И. Ролдугина. – Долгопрудный: Интеллект, 2010. – 504 с. <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+4176+default+19+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>

### **б) дополнительная литература**

1. Фларри, Р. Квантовая химия. Введение / Р. Фларри; под ред. А. М. Бродского; пер.с англ. Э. Д. Германа, Е. Л. Розенберга. – М.: Мир, 1985. – 472 с. <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+5488+default+12+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>

2. Полторац, О. М. Термодинамика в физической химии / О. М. Полторац. – М.: Высшая школа, 1991. – 317 с. <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+4176+default+2+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>

3. Физическая химия: в 2 кн. / К. С. Краснов [и др.]; под ред. К. С. Краснова. – М.: Высшая школа. Кн. 2: Электрохимия. Химическая кинетика и катализ. – Изд. 3-е, испр. – 2001. – 319 с. <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+4176+default+12+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>

4. Умрихин, В. А. Физическая химия / В. А. Умрихин. – М.: КДУ, 2009. – 231 с. <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+4176+default+5+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>

Электронно-библиотечные системы (ЭБС):

1. ЭБС «Электронная библиотека БашГУ»: <https://elib.bashedu.ru/>
2. ЭБС «Университетская библиотека онлайн»: <http://www.biblioclub.ru/>
3. ЭБС издательства «Лань»: <http://e.lanbook.com/>

Базы данных (БД):

1. Научная электронная библиотека: <http://elibrary.ru/>
2. БД периодических изданий (на платформе EastView): <https://dlib.eastview.com/>
3. SCOPUS: <http://www.scopus.com/>
4. БД периодических изданий «ИВИС».

Пример экзаменационного билета:

УФИМСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ  
Экзаменационные билеты 2023/24 учебного года  
Экзамен по специальной дисциплине  
НАУЧНАЯ СПЕЦИАЛЬНОСТЬ  
1.4.4. Физическая химия

**Экзаменационный билет № 1**

1. Химическое равновесие. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа.
2. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Лэнгмюра. Уравнение Брунауэра – Эмета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции.
3. Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы ее определения.
4. Дополнительный вопрос по теме диссертационного исследования.