

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Алтайский государственный университет»
Институт химии и химико-фармацевтических технологий

Утверждено:
решением ученого совета Университета
протокол № 6
от «30» июня 2020 г.

ПРОГРАММА

государственной итоговой аттестации
выпускников по направлению подготовки
04.06.01 Химические науки

Направленность
«Физическая химия»

Форма обучения очная, заочная

Барнаул 2020

Визирование программы для исполнения в очередном учебном году

Программа ГИА пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 2020 – 2021 учебном году на заседании ученого совета ИХиХФТ протокол № 6 от «19» июня 2020 г.

Внесены следующие изменения и дополнения:

Изменения и дополнения отсутствуют

Визирование программы для исполнения в очередном учебном году

Программа ГИА пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 2021 – 2022 учебном году на заседании ученого совета ИХиХФТ протокол № 4 от «01» июля 2021 г.

Внесены следующие изменения и дополнения:

Изменения и дополнения отсутствуют

1. Место государственной итоговой аттестации в учебном процессе

Программа государственной итоговой аттестации составлена на основании Федерального государственного образовательного высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации) и учебного плана по направлению 04.06.01 Химические науки, направленности (профиля): Физическая химия.

Государственная итоговая аттестация, завершающая освоение имеющих государственную аккредитацию основных образовательных программ подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре, является итоговой аттестацией обучающихся в аспирантуре по программам подготовки научно-педагогических кадров.

Государственная итоговая аттестация проводится государственными экзаменационными комиссиями в целях определения соответствия результатов освоения обучающимися основных образовательных программ подготовки научно-педагогических кадров соответствующим требованиям федерального государственного образовательного стандарта. К государственной итоговой аттестации допускаются обучающиеся, в полном объеме выполнившие учебный план или индивидуальный учебный план по соответствующим образовательным программам. В соответствии с ФГОС ВО (подготовка кадров высшей квалификации) по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки в блок «Государственная итоговая аттестация» входят:

- подготовка к сдаче и сдача государственного экзамена;
- представление научного доклада об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации).

Государственная итоговая аттестация предназначена определить степень развития следующих компетенций выпускников аспирантуры:

универсальных компетенций выпускника: УК-1, УК-2, УК-3, УК-4, УК-5;

общепрофессиональных компетенций выпускника: ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3;

профессиональных компетенций выпускника: ПК-1, ПК-2, ПК-3.

Общая трудоемкость государственной итоговой аттестации составляет 9 зачетных единиц (324 часа): подготовка к сдаче и сдача государственного экзамена – 3 зачетные единицы (108 часа), защита выпускной квалификационной работы – 6 зачетных единиц (216 часов).

2. Цели и задачи государственной итоговой аттестации

Цель государственной итоговой аттестации – установление соответствия уровня профессиональной подготовки выпускников требованиям ФГОС ВО, оценка качества освоения ОП ВО и степени овладения выпускниками необходимых компетенций.

Задачи:

- оценка степени подготовленности выпускника к основным видам профессиональной деятельности: научно-исследовательской деятельности и преподавательской деятельности по образовательным программам высшего образования;
- оценка уровня сформированности у выпускника необходимых компетенций, степени владения выпускником теоретическими знаниями, умениями и практическими навыками для профессиональной деятельности;
- оценка готовности аспиранта к защите диссертации на соискание ученой степени кандидата наук.

3. Содержание государственной итоговой аттестации

3.1. Государственный экзамен

Государственный экзамен представляет собой итоговое испытание по дисциплинам образовательной программы, результаты освоения которых имеют значение для профессиональной деятельности выпускников, в том числе для преподавательского и научного видов деятельности Физическая химия, Педагогика высшей школы.

Государственный экзамен проводится в устной форме по билетам. Каждый из билетов содержит по два вопроса: 1 вопрос из Раздела 1 – Педагогика высшей школы и 1 вопрос из Раздела 2 – Физическая химия.

Результаты государственного экзамена определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». Оценки «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» означают успешное прохождение государственного аттестационного испытания.

Обучающийся получивший по результатам государственного экзамена оценку «неудовлетворительно», не допускаются к государственному аттестационному испытанию – представлению научного доклада об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации).

Раздел 1 – Педагогика высшей школы

Сущность педагогической науки: место педагогики в системе наук о человеке, предмет и основные педагогические категории, ведущие отрасли современной педагогики. Специфика педагогики: предмет, цели, задачи педагогики, сфера ее исследований. Педагогика как система (основные разделы).

Образование как общественное явление. Современные тенденции его развития. Сущность и специфика современного образовательного процесса. Ведущие образовательные принципы и тенденции развития современного образования. Современные подходы к организации образовательного процесса. Личностная образовательная парадигма; деятельностный подход в организации обучения; аксиологический и культурологический подходы как основы образования XXI века.

Образовательный процесс в вузе, его характеристика. Сущность, закономерности и функции образовательного процесса в вузе. Структура образовательного процесса, базовые этапы его организации. Цели, содержание, формы и методы обучения в высшей школе. Специфика образовательного процесса в высшей школе.

Проблема понимания термина «педагогическая технология». Педагогическая технология как результат внедрения в педагогику системного способа мышления. Педагогическая технология как системная совокупность и порядок функционирования всех личностных, инструментальных и методологических средств, используемых для достижения педагогических целей. Уровни педагогических технологий. Основные структурные составляющие педагогических технологий в высшей школе. Основные методологические требования к педагогической технологии в высшей школе.

Актуальность коллективных способов обучения. Различие между групповыми и коллективными способами обучения. Основные методики КСО: изучение текстового материала по любой учебной дисциплине; взаимопередача текстов, взаимобмен заданиями. Групповые технологии: классно-урочная организация, лекционно-семинарская система, дидактические игры, бригадно-лабораторный метод. Психолого-педагогическое обоснование группового метода, преимущества группового обучения, типы и технология группового обучения. Сравнительный анализ технологий КСО и ГСО.

Понятие знаково-контекстного обучения. Задачи высшего профессионального образования. Контекстность обучения. От реальности профессиональной деятельности к пониманию соответствующей знаковой системы, ее развернутости в образовательном пространстве и к распрямлению в учебном процессе. Базовые формы обучения: учебная деятельность академического типа, квазипрофессиональная деятельность, учебно-профессиональная деятельность. Переходные формы обучения: лабораторно-практические занятия, имитационное моделирование, анализ производственных ситуаций, разыгрывание ролей, спецкурсы и спецсеминары.

Теоретические и концептуальные положения современных технологий интегративного обучения в высшей школе. Современные интегративно-педагогические концепции. Дифференциация и интеграция – две стороны развития научного познания. Интеграция и системный подход в развитии современной науки. Синергетический подход

и системный анализ в современном образовании. Междисциплинарность технической и гуманитарной подготовки как системообразующий фактор. Типология междисциплинарных связей и постановка прикладных задач по реализации механизмов интеграции в учебном процессе.

Представление о технологиях модульного обучения в высшей школе. Понятие «обучающего модуля». Принципы модульного обучения. Особенности структурирования курса в модульном обучении. Особенности организации педагогического контроля в модульном обучении. Преимущества модульного обучения.

Понятия, классификации педагогической специфики активных методов обучения, игровых технологий. Проблема активности личности в обучении. Понятие «активное обучение». Классификация активных методов обучения. Характеристика основных активных методов обучения. Теория и классификация игр. Игровые педагогические технологии.

Основные функции и признаки проблемного обучения. Виды и уровни проблемного обучения. Проблемная ситуация как основной элемент проблемного обучения. Основные способы создания проблемных ситуаций: столкновение с жизненными явлениями, организация практической работы, анализ жизненных явлений, формулирование гипотез, побуждение к логическим операциям, исследовательские задания. Организация проблемного обучения.

Роль самостоятельной работы студентов в образовательном процессе. Планирование самостоятельной работы студентов. Самостоятельное научное исследование в системе самостоятельной работы студентов. Самостоятельная работа с литературой.

Сущность дистанционного образования, его основные технологические компоненты и процессуальные характеристики. Классификация систем и методов дистанционного образования. Требования к учебным курсам дистанционного образования. Особенности построения учебного процесса с использованием СДО. Дидактические принципы дистанционного обучения.

Сущность педагогической деятельности, ее основные виды и структура. Специфика педагогической деятельности в вузе: цель, базовые функции. Рациональная организация деятельности педагога высшей школы. Ситуативный подход к пониманию сущности педагогической деятельности, технология решения педагогических ситуаций различного типа. Инновационная педагогическая деятельность, ее целевые ориентиры и сущностные характеристики. Функции и виды контроля и оценки качества обучения. Рейтинговая система как средство контроля учебной деятельности и оценка уровня усвоения знаний студентами.

Специфика педагогической культуры, ее структурные компоненты. Культура педагогического общения. Структура процесса педагогического взаимодействия с субъектами образовательного процесса. Базовые умения профессионального общения. Педагогическое мастерство как слагаемое профессиональной компетентности педагога. Уровни овладения педагогическим мастерством.

Раздел 2 – Физическая химия.

I. Строение вещества

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

2. *Физические основы учения о строении молекул.* Механическая модель молекулы. Потенциалы парных взаимодействий. Методы молекулярной механики и молекулярной динамики при анализе строения молекул.

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

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

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

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

Электронное строение атомов и молекул. Одноэлектронное приближение. Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Правило Хунда. Электронная плотность. Распределение электронной плотности в двухатомных молекулах. Корреляционные орбитальные диаграммы. Теорема Купманса. Пределы применимости одноэлектронного приближения.

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

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

Представления о зарядах на атомах и порядках связей. Различные методы выделения атомов в молекулах. Корреляции дескрипторов электронного строения и свойств молекул. Индексы реакционной способности. Теория граничных орбиталей.

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

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

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

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

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

6. *Основные результаты и закономерности в строении молекул.* Строение молекул простых и координационных неорганических соединений. Полиядерные комплексные соединения. Строение основных типов органических и элементоорганических соединений. Соединения включения. Полимеры и биополимеры.

7. *Строение конденсированных фаз.* Структурная классификация конденсированных фаз.

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

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

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

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

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

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

Мицеллообразование и строение мицелл.

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

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

II. Химическая термодинамика

Основные понятия и законы термодинамики

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

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

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

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

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

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

Элементы статистической термодинамики

5. Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые Г- и μ -пространства. Эргодическая гипотеза. Термодинамическая вероятность и её связь с энтропией. Распределение Максвелла – Больцмана.

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

Каноническая функция распределения Гиббса. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция. Статистические выражения для основных термодинамических функций. Молекулярная сумма по состояниям и сумма по состояниям макроскопической системы. Поступательная, вращательная, электронная и колебательная

суммы по состояниям. Статистический расчет энтропии. Постулат Планка и абсолютная энтропия.

Приближение «жесткий ротатор – гармонический осциллятор». Составляющие внутренней энергии, 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

6. Основные положения термодинамики неравновесных процессов. Локальное равновесие. Флуктуации. Функция диссипации. Потоки и силы. Скорость производства энтропии. Зависимость скорости производства энтропии от обобщенных потоков и сил. Соотношения взаимности Онсагера. Стационарное состояние системы и теорема Пригожина.

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

Растворы. Фазовые равновесия

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

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

Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия. Зонная плавка. Осмотические явления. Парциальные 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.

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

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

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

Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста.

Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.

Адсорбция и поверхностные явления

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

Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Ленгмюра. Адсорбция из растворов. Уравнение

Брунауэра – Эмета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента.

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

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

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

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

Электрохимические процессы

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

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

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

III. Кинетика химических реакций

Химическая кинетика

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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.

Катализ

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

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

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

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

11. *Гетерогенный катализ*. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Удельная и атомная активность. Селективность катализаторов. Роль адсорбции в кинетике гетерогенных каталитических реакций. Неоднородность поверхности катализаторов, нанесенные катализаторы. Энергия активации гетерогенных каталитических реакций.

Современные теории функционирования гетерогенных катализаторов.

Основные промышленные каталитические процессы.

3.2. Представление научного доклада об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации)

Результатом научных исследований аспиранта является научно-квалификационная работа (диссертация), в которой содержится решение задачи, имеющей значение для

развития соответствующей отрасли знаний, либо изложены новые научно обоснованные технические, технологические или иные решения и разработки, имеющие существенное значение для развития страны.

Научно-квалификационная работа (диссертация) должна быть написана аспирантом самостоятельно, обладать внутренним единством, содержать новые научные результаты и положения, выдвигаемые для публичной защиты, и свидетельствовать о личном вкладе аспиранта в науку. Предложенные аспирантом в диссертации решения должны быть аргументированы и оценены по сравнению с другими известными решениями.

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

В научно-квалификационной работе (диссертации) аспирант обязан ссылаться на автора и (или) источник заимствования материалов или отдельных результатов. При использовании в диссертации результатов научных работ, выполненных аспирантом лично и (или) в соавторстве, он обязан отметить в диссертации это обстоятельство.

Основные научные результаты научного исследования аспиранта должны быть опубликованы в рецензируемых научных изданиях и журналах (не менее двух/трех публикаций).

Научно-квалификационная работа (диссертация) должна быть подготовлена на русском языке.

Научный доклад об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации) представляет собой краткое изложение проведенных аспирантом научных исследований. В научном докладе излагаются основные идеи и выводы научно-квалификационной работы (диссертации), показывается вклад автора в проведенное исследование, степень новизны и практическая значимость приведенных результатов исследований, приводится список публикаций аспиранта, в которых отражены основные научные результаты диссертации.

Научно-квалификационная работа (диссертация) и текст научного доклада должны быть предоставлены на кафедру в печатном виде в твердом переплете в одном экземпляре, а также в электронном виде на электронном носителе не позднее, чем за месяц до защиты.

Научный руководитель дает письменный отзыв о выполненной научно-квалификационной работе (диссертации) аспиранта не позднее, чем за 14 календарных дней до представления научного доклада об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации).

Рецензенты (1 внутренний и 1 внешний) проводят анализ и представляют в Университет письменные рецензии на указанную работу не позднее, чем за 14 календарных дней до представления научного доклада об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации).

Аспирант должен быть ознакомлен с отзывом и рецензиями не позднее, чем за 7 календарных дней до представления научного доклада об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации).

Научно-квалификационная работа (диссертация), отзыв научного руководителя и рецензии передаются в государственную экзаменационную комиссию не позднее, чем за 7 календарных дней до представления научного доклада об основных результатах научно-квалификационной работы (диссертации).

Результаты представления научного доклада по выполненной научно-квалификационной работе (диссертации) определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». Оценки «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» означают успешное прохождение государственного аттестационного испытания.

По результатам представления научного доклада об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации) университет дает заключение, в соответствии с пунктом 16 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842.

4. Учебно-методическое и информационное обеспечение государственной итоговой аттестации

4.1. Основная литература

1. Харитонов Ю.Я. Физическая химия. Изд-во: ГЭОТАР-Медиа – 2009. [точка доступа <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970423905.html>]
2. Батенков В.А. Электрохимия полупроводников. – Барнаул: Изд-во Алт. ун-та, 2002. – 162 с. [8 экземпляров: КХ -1, УЕ -7].
3. Салем Р.Р. Теория двойного слоя. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. – 104 с. // ЭБС «Университетская библиотека online» [точка доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=82610>]
4. Громкова М.Т. Педагогика высшей школы: учеб. Пособие М.: Юнити-Дана , 2015 [точка доступа <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=117717>].
5. Бермус, А.Г. Введение в педагогическую деятельность: учебник Директ-Медиа, 2013 [точка доступа <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=209242>].
6. Измайлова Е.Н., Касимова Э.Г. Компетентностный подход в образовании : учебное пособие Уфа : Уфимский государственный университет экономики и сервиса, 2015 [точка доступа <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=445137>].
7. Татур Ю.Г. Высшее образование: методология и опыт проектирования : учебно-методическое пособие : учебно- методическое пособие Москва : Логос, 2006. [точка доступа <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=84742>].
8. Дудина М.Н. Дидактика высшей школы: от традиций к инновациям. Учебное пособие для вузов М.:Издательство Юрайт, 2018 [точка доступа <https://biblionline.ru/book/89C5A71F-385E-4033-9790-8997377D7528>].

4.2. Дополнительная литература

1. Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Теория строения молекул. Ростов-Дон: Феникс. 1997. [8 экземпляров НЕ -3, УЕ -5]
2. Эткинс Н. Физическая химия. Т. 1 и 2. М.: Мир. 1980. (В 2002 г. выйдет новое издание данного учебника в 3-х томах) [16 экземпляров: НЕ -3, КХ -3, УЕ -10]
3. Дамаскин Б. Б., Петрий О. А. Введение в электрохимическую кинетику. М.: Высшая школа. 1983. [5 экземпляров НЕ -4, УЕ -1]
4. Эмануэль Н. М., Кнорре Д. Г. Курс химической кинетики. М.: Высшая школа. 1984. [3 экземпляра КХ -3].
5. Фроловская М.Н. Гуманитарное основание профессиональной культуры педагога: монография Барнаул: Изд-во АлтГУ, 2011 [точка доступа <http://elibrary.asu.ru/handle/asu/652>].
6. Самойлов В.Д. Педагогика и психология высшей школы. Андрогогическая парадигма: учебник М. : ЮНИТИ- ДАНА: Закон и право, 2013 [точка доступа <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=448168>].

4.3. Программное обеспечение

1. Microsoft Windows 7 № 60674416 от 19.07.2012 г. (бессрочная);
2. Microsoft Office 2010 № 60674416 от 19.07.2012 г. (бессрочная);

5. Критерии оценки знаний, умений, навыков и заявленных компетенций

Критерии оценивания ответа аспиранта в ходе государственного экзамена

	Критерии оценивания
оценка «отлично»	аспирант исчерпывающе, логически и аргументировано излагает материал вопроса, тесно связывает теорию педагогики высшей школы с практикой

	вузовского обучения, методологию науки в целом – с практикой собственного научного исследования; обосновывает собственную точку зрения при анализе конкретной проблемы исследования, свободно отвечает на поставленные дополнительные вопросы, делает обоснованные выводы
оценка «хорошо»	аспирант демонстрирует знание базовых положений в области педагогики высшей школы, методологии науки и организации исследовательской деятельности; проявляет логичность и доказательность изложения материала, но допускает отдельные неточности при использовании ключевых понятий; в ответах на дополнительные вопросы имеются незначительные ошибки
оценка «удовлетворительно»	аспирант поверхностно раскрывает основные теоретические положения педагогики высшей школы, методологии науки и организации исследовательской деятельности, у него имеются базовые знания специальной терминологии по педагогике высшей школы, методологии науки и организации исследовательской деятельности; в усвоении материала имеются пробелы, излагаемый материал не систематизирован; выводы недостаточно аргументированы, имеются смысловые и речевые ошибки
оценка «неудовлетворительно»	аспирант допускает фактические ошибки и неточности в области педагогики высшей школы, методологии науки и организации исследовательской деятельности, у него отсутствует знание специальной терминологии, нарушена логика и последовательность изложения материала; не отвечает на дополнительные вопросы по рассматриваемым темам, не может сформулировать собственную точку зрения по обсуждаемому вопросу

Критерии оценивания научного доклада об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации)

	Критерии оценивания
оценка «отлично»	Достаточно полно обоснована актуальность исследования, предложены варианты решения исследовательских задач, имеющих конкретную область применения. Доказано отличие полученных результатов исследования от подобных, уже имеющих в науке. Для обоснования исследовательской позиции взята за основу конкретная теоретическая концепция. Сформулирован терминологический аппарат, определены методы и средства научного исследования. Замысел и целевые характеристики проведенного исследования научно обоснованы, материалы - аргументированы. Научная новизна и теоретическая значимость четко сформулированы. Основной текст ВКР изложен в единой логике, соответствует требованиям научности и конкретности, утверждения и выводы обоснованы.
оценка «хорошо»	Достаточно полно обоснована актуальность исследования, предложены варианты решения исследовательских задач, имеющих конкретную область применения. Доказано отличие полученных результатов исследования от подобных, уже имеющих в науке. Для обоснования исследовательской позиции взята за основу конкретная теоретическая концепция. Сформулирован терминологический аппарат, определены методы и средства научного исследования, замысел и целевые характеристики проведенного исследования научно обоснованы, материалы - аргументированы. Научная новизна и теоретическая значимость четко сформулированы. Основной текст ВКР изложен в единой логике, в основном соответствует требованиям научности и конкретности, но могут встречаться недостаточно обоснованные утверждения и выводы.

оценка «удовлетворительно»	Достаточно полно обоснована актуальность исследования, предложены варианты решения исследовательских задач, имеющих конкретную область применения. Доказано отличие полученных результатов исследования от подобных, уже имеющихся в науке. Для обоснования исследовательской позиции взята за основу конкретная теоретическая концепция. Сформулирован терминологический аппарат, определены методы и средства научного исследования, Но вместе с тем может не быть должного научного обоснования по поводу замысла и целевых характеристик проведенного исследования, должной аргументированности представленных материалов. Может быть нечетко сформулированы научная новизна и теоретическая значимость. Основной текст ВКР изложен в единой логике, в основном соответствует требованиям научности и конкретности, но могут встречаться недостаточно обоснованные утверждения и выводы.
оценка «неудовлетворительно»	Актуальность выбранной темы обоснована поверхностно. Имеются несоответствия между поставленными задачами и положениями, выносимыми на защиту. Теоретико-методологические основания исследования раскрыты слабо. Понятийно- категориальный аппарат не в полной мере соответствует заявленной теме. Отсутствуют научная новизна, теоретическая и практическая значимость полученных результатов. В формулировке выводов по результатам проведенного исследования нет аргументированности и самостоятельности суждений. Текст работы не отличается логичностью изложения, носит эклектичный характер и не позволяет проследить позицию автора по изучаемой проблеме.

6. Фонд оценочных средств

для проведения государственной итоговой аттестации

Оценочные средства для проведения государственной итоговой аттестации представляют собой перечень вопросов, выносимых на государственный экзамен, а также требования к представлению научного доклада и критерии его оценивания.