

К распоряжению Первого проректора –
проректора по научной работе
от _____ № _____

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Южно-Уральский государственный университет
(национальный исследовательский университет)»

УТВЕРЖДАЮ
Первый проректор-проректор
по научной работе

_____ А.В. Коржов

« _____ » _____ 2022 г.

ПРОГРАММА

кандидатского экзамена по специальной дисциплине:

Физическая химия

Научная специальность: **1.4.4. Физическая химия** Шифр и наименование научной специальности в соответствии с номенклатурой, утвержденной приказом Министерства науки и высшего образования РФ от 24.02.21 г. № 118

Разработчики:

(Авдин В.В., д.х.н., профессор, зав. каф. ЭиХТ)

(Барташевич Е.В., д.х.н., доцент, профессор ТиПХ)

Челябинск 2022 г.

РАЗДЕЛЫ ПРОГРАММ КАНДИДАТСКИХ ЭКЗАМЕНОВ

1. Перечень тем для подготовки к кандидатскому экзамену:
 - 1) Разные уровни понятия “структура” в физической химии
 - 2) Современная теория химической связи: нековалентные взаимодействия
 - 3) Моделирование структуры кристаллов и их физико-химических свойств
 - 4) Молекулярная механика
 - 5) Молекулярная динамика
 - 6) Квантово-химические расчеты
 - 7) Квантовая теория атомов в молекулах
 - 8) Применение суперкомпьютеров в физической химии
 - 9) Строение конденсированных фаз
 - 10) Поверхность конденсированных фаз
 - 11) Основные понятия и законы термодинамики
 - 12) Растворы. Фазовые равновесия
 - 13) Адсорбция и поверхностные явления
 - 14) Химическая кинетика
 - 15) Катализ
2. Вопросы для подготовки к сдаче кандидатского экзамена с учетом отрасли науки
 1. Разные уровни понятия “структура” в химии. Исторический аспект изучения взаимосвязей «структура - свойство». Взаимосвязи «структура – химико-химическое свойство», «структура – биологическая активность», «структура – реакционная способность». Экспериментальные и теоретические методы установления структуры химических соединений. Моделирование структуры атомно-молекулярных систем – статус компьютерного эксперимента.
 2. Современная теория химической связи: нековалентные взаимодействия, именуемые по принципу предоставления электрофильного сайта связанным атомом: галогенные связи, халькогенные связи, пниктогенные связи, тетрельные связи. Свойства электронной плотности, полного статического и электростатического потенциалов в описании нековалентных связей.
 3. Моделирование структуры кристаллов и их свойств. Периодические граничные условия. Приближения слабой и сильной связи. Вычислительные процедуры тензоров упругости для кристаллов. Современные подходы к изучению полиморфизма молекулярных кристаллов.
 4. Молекулярная механика. Область применения в современном моделировании атомно-молекулярных систем. Силы Ван-дер-Ваальса, потенциал Леннард-Джонса, электростатические взаимодействия по закону Кулона. Современные силовые поля. Программное обеспечение, которое реализует методы молекулярной механики.
 5. Молекулярная динамика и моделирование атомно-молекулярных систем из первых принципов. Силы межатомного взаимодействия. История развития метода. Возможности гибридного метода QM/MM (quantum mechanics/molecular mechanics) Программное обеспечение, которое реализует метод молекулярной динамики.
 6. Вычислительные методы в физической химии: квантово-химические расчеты методом самосогласованного поля для решений уравнений Хартри-Фока. Приближение невзаимодействующих электронов. Обмен и корреляция.

7. Теория функционала плотности (DFT). Теорема Кона-Шэма, вариационный принцип Хоэнберга-Кона. Метод Томаса-Ферми для функционала плотности. Особенности и многообразие обменно-корреляционных функционалов в DFT. Методы TD-DFT. Программное обеспечение, которое реализует метод теории функционала плотности.
8. Теория возмущений Меллера-Плессе. Эффекты электронной корреляции с помощью теории возмущений Рэлея-Шредингера. Основы многоконфигурационных методов самосогласованного поля (MCSCF), полной теории возмущений активного пространства (CASPT2) и мультikonфигурационной квазивыврожденной теории возмущений (MCQDPT). Программное обеспечение.
9. Квантовая теория атомов в молекулах. Стационарный принцип Швингера. Электронная плотность и анализ ее распределения в молекулах и кристаллах. Понятие Бэйдеровского атома, атомного заряда. Сигнатура критических точек электронной плотности, связевые пути.
10. Задачи компьютерного моделирования в физической химии, требующие высокопроизводительных вычислений и параллельного программирования. Классификация функций MPI и основные понятия. Применение суперкомпьютеров. Обзор высокопроизводительных систем в России и за рубежом.
11. Структурная классификация конденсированных фаз. Идеальные кристаллы. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах. Кристаллы с неполной упорядоченностью. Доменные структуры. Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов. Цепочечные, каркасные и слоистые структуры.
12. Симметрия кристаллов. Кристаллографические точечные группы симметрии, типы решеток, сингонии. Понятие о пространственных группах кристаллов. Индексы кристаллографических граней.
13. Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов. Цепочечные, каркасные и слоистые структуры.
14. Строение твердых растворов. Упорядоченные твердые растворы. Аморфные вещества. Особенности строения полимерных фаз.
15. Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов. Поверхность Ферми. Различные типы проводимости.
16. 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.
17. Мицеллообразование и строение мицелл. Мезофазы. Пластические кристаллы. Жидкие кристаллы (нематики, смектики, холестерики и др.).
18. Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей, структура границы раздела конденсированных фаз. Молекулы и кластеры на поверхности. Структура адсорбционных слоев.
19. 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 и второй законы термодинамики. Закон действующих масс.
20. 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.
21. 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.

22. 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-Эммета Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента.

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

23. Свободная поверхностная энергия, поверхностное натяжение, избыточные термодинамические функции поверхностного слоя. Изменение поверхностного натяжения на границе жидкость пар в зависимости от температуры. Эффект Ребиндера. Капиллярные явления. Зависимость давления пара от кривизны поверхности жидкости. Капиллярная конденсация. Зависимость растворимости от кривизны поверхности растворяющихся частиц (закон Гиббса-Оствальда-Фрейндлиха).

24. 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. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы ее определения.

25. *Классификация каталитических реакций* и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия. 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. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

3.1 Основная литература

1. Бейдер, Р. Атомы в молекулах: Квантовая теория Учеб. Р. Бейдер; Пер. с англ. Е. С. Апостоловой и др.; Под ред. М. Ю. Антипина, В. Г. Цирельсона. – М.: Мир, 2001. – 532 с.
2. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела учеб. пособие для вузов по химико-технол. направлениям и специальностям В. Г. Цирельсон. – 3-е изд., испр. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 495 с. ил., [12] л. цв. ил.; табл.
3. Введение в хемоинформатику: учебное пособие в 5-ти частях. Баскин И.И., Маджитов Т.И., Варнек А.А. Казань: Изд-во Казанского университета, 2016 г., Тираж 150, ISBN 978-5-00019-694-6.
4. Ибрагимов, И. М. Основы компьютерного моделирования наносистем: учебное пособие / И. М. Ибрагимов, А. Н. Ковшов, Ю. Ф. Назаров. – Санкт-Петербург: Лань, 2010. – 384 с. – ISBN 978-5-8114-1032-3. – Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система.
5. Строение вещества. Строение кристаллов: учебное пособие / под редакцией К. Н. Мохова. – Москва: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2010. – 35 с. – Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система.
6. Полторак О. М. Термодинамика в физической химии. М.: Высш. шк., 1991.
7. Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. М.: Мир, 2002.
8. Смирнова Н. А. Методы статистической термодинамики в физической химии. М.: Высш. шк., 1982.

9. Дамаскин Б. Б., Петрий О. А. Введение в электрохимическую кинетику. М.: Высш. шк., 1983.
 10. Денисов Е. Т., Саркисов О. М., Лихтенштейн Г. И. Химическая кинетика. М.: Химия, 2000.
 11. Эмануэль Н. М., Кнорре Д. Г. Курс химической кинетики. М.: Высш. шк., 1984.
- 3.2 Дополнительная литература
1. Chemical reactivity theory: a density functional view // P. K. Chattaraj et al.; ed. by P. K. Chattaraj. – Boca Raton et al.: CRC Press : Taylor and Francis Group, 2009.
 2. Koch W., Holthausen M. C. A Chemist's Guide to Density Functional Theory. – ed. – Weinheim: Wiley-VCH, 2002.
 3. Parr R. G., Yang W. Density-Functional Theory of Atoms and Molecules. – New York: Oxford University Press, 1989.
 4. Шлютер М., Шэм Л. Теория функционала плотности // Физика за рубежом. Сборник статей. 1983 / М., Мир, 1983. – с. 179-203.
 5. А. В. Погребняк. Молекулярное моделирование и дизайн биологически активных веществ. – Ростов-на-Дону: Издательство СКНЦ ВШ, 2003. – ISBN 5-87872-258-5.
 6. Рапапорт Д. К. Искусство молекулярной динамики. – Ижевск: ИКИ, 2012. – 632 с. – ISBN 978-5-4344-0083-1.
 7. Х.-Д. Хельтье, В. Зиппель, Д. Роньян, Г. Фолькерс, Молекулярное моделирование Теория и практика, 2010, ISBN 978-5-9963-0156-0.
 8. Агеев Е. П. Неравновесная термодинамика в вопросах и ответах. М.: Изд-во МГУ, 1999.
 9. Адамсон А. Физическая химия поверхностей. М.: Мир, 1979.
 10. Дамаскин Б. Б., Петрий О. А., Цирлина Г. А. Электрохимия. М.: Химия, 2001.
 11. Даниэльс Ф., Олберти Р. Физическая химия. М.: Мир, 1978.
 12. Дуров В. А., Агеев Е. П. Термодинамическая теория растворов неэлектролитов. М.: Изд-во МГУ, 1987.
 13. Хаазе Р. Термодинамика необратимых процессов М.: Мир, 1967.
 14. Эткинс Н. Физическая химия. Т. 1, 2. М.: Мир, 1980.
 15. Панченков Г. М., Лебедев В. П. Химическая кинетика и катализ. М.: Химия, 1985.
4. Условия допуска к экзамену
- Условием допуска аспиранта (соискателя) к кандидатскому экзамену по специальной дисциплине «Физическая химия» является успешное освоение всех дисциплин (положительная оценка) и прохождение всех практик без академических задолженностей на период окончания 6-го семестра Образовательной программы по направлению подготовки (04.06.01 Химические науки).
5. Процедура проведения экзамена
- Кандидатский экзамен по специальной дисциплине «Физическая химия» (Научная специальность 1.4.4. Физическая химия) проводится в устной форме по билетам. В каждом билете содержится 2 вопроса из заранее предоставляемого аспиранту списка вопросов. По желанию аспирант может сопровождать свой устный ответ письменным. Критериями оценивания ответа аспиранта на задание (вопросы билета) являются 1) уровень и степень владения теоретическим материалом, 2) эрудированность в обсуждаемых вопросах, 3) способность отвечать на дополнительные вопросы по теме билета. Итоговая оценка ответа аспиранта выставляется по пятибалльной шкале на основании суммарного оценивания по каждому из вышеуказанных критериев.