# **Программа вступительного экзамена по направлению подготовки 04.06.01«Химические науки»**

Целью вступительного испытания является оценка уровня освоения поступающим компетенций, необходимых для обучения по направлению 04.06.01«Химические науки» ПО ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫМ ПРОГРАММАМ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ – ПРОГРАММАМ ПОДГОТОВКИ НАУЧНО-ПЕДАГОГИЧЕСКИХ КАДРОВ В АСПИРАНТУРЕ. Программы вступительных испытаний при приеме на обучение в аспирантуре формируются на основе федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования (СУОС Университета ИТМО) по программам специалитета или магистратуры.

Форма вступительного испытания: устно-письменная

Форма вступительного испытания с использованием дистанционных технологий: тест, устно-письменная

Продолжительность проведения вступительного испытания. Продолжительность вступительного испытания - не более 90 минут.

Критерии оценивания: “неудовлетворительно”, “Удовлетворительно”, “Хорошо”, “Отлично”

Минимальный проходной балл, подтверждающий успешное прохождение вступительных испытаний: оценка “удовлетворительно”.

Перечень принадлежностей, которые поступающий имеет право пронести в аудиторию во время проведения вступительного испытания: письменные принадлежности, непрограммируемый калькулятор.

# **Профиль подготовки 02.00.04 «Физическая химия»**

1. Дипольный момент связи. Электроотрицательность атомов. Факторы, влияющие на дипольный момент молекулы. Поляризуемость молекул. Поляризация вещества. Диэлектрическая постоянная. Магнитный момент частиц. Парамагнетизм и диамагнетизм.
2. Ван-дер-ваальсовы взаимодействия. Ковалентные и ван-дер-ваальсовы радиусы атомов. Модели молекул. Водородная связь. Взаимодействие ионов.
3. Газы, жидкости, твердые тела, кристаллы. Пространственная решетка. Простейшие ионные, атомные и металлические решетки (решетка хлористого натрия, алмаза, кубические, гранецентрированные и плотноупакованные решетки).
4. Основные этапы развития представлений о катализе. Физические и химические теории катализа. Взаимодействие катализатора и реакционной среды. Дезактивация катализаторов. Нестационарный катализ.
5. Металлическая проводимость. Изоляторы и полупроводники. Уровень Ферми. Электронная и дырочная проводимость.
6. Электромагнитное излучение и вещество. Физическая сущность и информативность методов: электронной спектроскопии, колебательной и вращательной спектроскопии. Магнитной радиоспектроскопии. Электронный парамагнитный резонанс и свободные радикалы. Ядерный магнитный резонанс: химический сдвиг и расщепление сигналов.
7. Термодинамические параметры. Теплота и работа. Внутренняя энергия и первое начало термодинамики. Уравнения состояния. Системы: открытые, закрытые и изолированные.
8. Обратимые и необратимые процессы. Энтропия и второе начало термодинамики. Фундаментальные уравнения Гиббса. Термодинамические потенциалы и характеристические функции. Энтальпия, энергия Гельмгольца и энергия Гиббса. Направление самопроизвольного процесса и условия равновесия.
9. Гомогенные и гетерогенные системы. Химические переменные и число независимых реакций. Парциальные молярные величины компонентов. Химические потенциалы. Уравнения Гиббса-Дюгема. Правило фаз Гиббса.
10. Изохорная и изобарная теплоемкости. Температурная зависимость термодинамических свойств вещества. Третье начало термодинамики и абсолютные значения энтропии веществ. Уравнения Гиббса–Гельмгольца.
11. Тепловые эффекты реакций. Энтальпии образования химических соединений. Стандартные состояния. Закон Гесса. Определение теплоты реакции из теплот сгорания. Расчет энтальпии реакций из термодинамических свойств веществ. Закон Кирхгофа.
12. Уравнения состояния и термодинамический потенциал идеального газа. Стандартный термодинамический потенциал реального газа и летучесть. Фазовое равновесие в однокомпонентной системе, уравнение Клаузиуса–Клапейрона.
13. Энтропия смешения идеальных газов. Химический потенциал компонента идеальной газовой смеси. Изотерма химической реакции. Константа равновесия. Температурная зависимость константы равновесия — изобара Вант Гоффа.
14. Смещение равновесия и принцип Ле Шателье – Брауна. Реакции с участием конденсированных несмешанных фаз и идеальных газов. Учет неидеальности газовой фазы. Расчет констант равновесия. Расчет равновесного состава.
15. Идеальные растворы: совершенные и предельно разбавленные. Химические потенциалы компонентов идеальных растворов. Равновесие жидкость — пар: законы Рауля и Генри. Неидеальный раствор, активность. Химическое равновесие в растворах.
16. Фазовые равновесия раствора с чистым компонентом. Мембранное равновесие и осмотическое давление. Равновесия между двумя двухкомпонентными фазами. Зависимость равновесных давлений от состава. Азеотропия. Фазовые диаграммы (кипения и плавкости) бинарных систем. Эвтектика.
17. Химический потенциал электролита в растворе: активности электролитов, среднеионные величины и стандартные значения. Водородная шкала. Зависимость коэффициента активности от ионной силы по теории Дебая – Хюккеля.
18. Кислотно - основное равновесие. Константа ионизации и константа основности. Ионное произведение воды. Концентрация ионов водорода (pH).
19. Гальванические элементы. ЭДС и потенциалы электродов. Окислительно-восстановительное равновесие. Уравнение Нернста. Типы электродов. Водородный электрод. Стандартные электродные потенциалы и условные термодинамические функции ионов.
20. Поверхностное натяжение. Изотерма адсорбции Гиббса. Теплота и энтропия адсорбции. Изотерма Лэнгмюра. Полимолекулярная адсорбция паров — изотерма БЭТ.
21. Механизм химической реакции. Скорость химической реакции. Простые реакции. Закон действующих масс. Порядок реакции. Константа скорости химической реакции. Уравнение Аррениуса. Предэкспоненциальный множитель и энергия активации.
22. Кинетические уравнения и кинетические кривые для реакций 1-го, 2-го и 3-го порядков. Сложные реакции: обратимые, параллельные и последовательные. Метод стационарных концентраций и квазиравновесное приближение. Лимитирующая стадия.
23. Кинетическое описание реакций в открытых системах. Реакторы полного перемешивания и идеального вытеснения.
24. Методы определения порядка реакции и кинетических констант из экспериментальных данных.
25. Методы расчета константы скорости реакций. Теория столкновений. Фактор двойных столкновений и стерический фактор. Теория активированного комплекса. Поверхность потенциальной энергии, координата реакции и переходное состояние. Условия применимости теории активированного комплекса. Теория Линдемана.
26. Кинетика реакций в жидкости. Диффузионно контролируемые. Клеточный эффект. Учет влияния среды.
27. Нетермическое инициирование химических реакций. Сопряженные реакции и химическая индукция. Фотохимические реакции. Основной фотохимический закон. Закон Бугера-Ламберта-Бэра. Квантовый выход.
28. Основные стадии цепных реакций. Диффузионный и кинетический контроль реакций линейного обрыва на стенках. Неразветвленные цепные реакции. Выражение для средней длины цепи. Разветвленные цепные реакции. Нижний и верхний пределы самовоспламенения.
29. Определение катализа и катализатора. Катализ и химическое равновесие. Классификация каталитических процессов. Промоторы и каталитические яды. Каталитическая активность и избирательность. Методы измерения.
30. Природа действия катализаторов. Факторы, определяющие скорость химического превращения. Понятие о каталитическом цикле.