# ***Программа вступительного экзамена по направлению***

# ***1.4. Химические науки***

**Целью** вступительного испытания является оценка уровня освоения поступающим компетенций, необходимых для обучения по направлению ***1.4. «Химические науки»***по программам подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре.

**Программы вступительных испытаний при приеме на обучение в аспирантуре формируются** на основе требований Национального исследовательского Университета ИТМО. Экзамен проводится по билетам. Билет содержит 2 вопроса в соответствии с программой, а также вопрос о планируемом диссертационном исследовании абитуриента.

**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.

# **Научная специальность 1.4.1. «Неорганическая химия»**

1. Основные понятия химии: атом, молекула, химический элемент, изотопы, простое и сложное вещество, эквивалент, моль. Основные стехиометрические законы, их развитие.
2. Развитие представлений о строении атома: ядро, протоны, нейтроны, электроны. Волновая теория строения атома, двойственная природа электрона, принцип неопределённости. Квантовомеханические представления о строении электронных оболочек атома: понятие о волновой функции, электронной плотности и её радиальном распределении в атоме водорода, радиусе атома, квантовых числах, s-, p-, d- и f-состояниях электронов, энергетическом уровне, подуровне, атомной орбитали. Принцип Паули и емкость электронных оболочек, правило Хунда. Строение электронных оболочек многоэлектронных атомов, энергия атомных орбиталей.
3. Периодический закон Д.И. Менделеева, развитие учения о периодичности. Длинная и короткая формы периодической системы, периоды, группы и подгруппы, семейства элементов. Периодичность изменения свойств атомов (радиусов, ионизационных потенциалов, сродства к электрону, электроотрицательности) как следствие периодичности изменения структур электронных оболочек атомов. Периодичность изменения химических свойств простых веществ и химических соединений (кислотно-основных, окислительно-восстановительных) по периодам и группам. Изменение валентности по периодам и группам. Изменение свойств элементов по периодам и группам в зависимости от структуры внешней и предвнешней электронных оболочек и радиусов атомов.
4. Механизм образования химической связи, её характеристики, типы связей. Свойства ковалентной связи: насыщаемость связи, понятие валентности, развитие этого понятия; направленность ковалентной связи. Теории ковалентной связи: теория валентных связей (ВС), теория молекулярных орбиталей (МО). Концепция гибридизации атомных орбиталей, пространственное строение молекул и ионов. Ионная связь. Свойства ионной связи, отличие в свойствах соединений с ионной и ковалентной связью. Трактовка полярных связей согласно концепции поляризации ионов.
5. Металлическая связь. Водородная связь. Связь в газообразных, жидких и твердых веществах. Силы межмолекулярного взаимодействия. Агрегатное состояние веществ как проявление взаимодействия между атомами и молекулами. Строение веществ в конденсированном состоянии. Типы кристаллических решеток. Зависимость физических свойств веществ от их структуры.
6. Основы координационной теории Вернера. Состав комплексных соединений, пространственная конфигурация комплексных ионов. Положение в периодической системе элементов, являющихся типичными комплексообразователями и донорными атомами моно- и полидентантыхлигандов. Классы комплексных соединений: одноядерные с моно- и полидентатнымилигандами; многоядерные комплексы; π-комплексы; карбонилы. Изомерия комплексных соединений и комплексного иона. Химическая связь в комплексных соединениях с точки зрения электростатического подхода, теории валентных связей и теории молекулярных орбиталей. Теория кристаллического поля, применение ее для объяснения магнитных свойств и цветности комплексов. Комплексообразование в растворах. Устойчивость комплексных ионов.
7. Энергетика химических реакций. Закон Гесса и следствия из него. Расчет тепловых эффектов различных реакций. Внутренняя энергия и энтальпия. Энтропия. Энергия Гиббса, направление протекания химических процессов. Обратимые и необратимые химические реакции. Химическое равновесие. Константа равновесия, закон действующих масс для равновесия. Смещение химического равновесия, принцип Ле-Шателье. Факторы, влияющие на равновесие: концентрация, температура, давление.
8. Скорость химических реакций. Влияние различных факторов на скорость реакции: концентрации веществ, давления (для реакций, протекающих в газовой фазе), температуры, катализатора. Закон действующих масс. Правило Вант-Гоффа. Понятие об энергии активации. Гомогенный и гетерогенный катализы, их механизмы.
9. Истинные растворы. Образование растворов. Тепловые эффекты при растворении. Гидратная теория Д.И. Менделеева. Гидраты, сольваты, кристаллогидраты. Растворимость газов, жидкостей, твердых веществ в воде. Свойства разбавленных растворов неэлектролитов. Осмос, осмотическое давление. Давление насыщенного пара растворителя над раствором, понижение давления пара. Повышение температуры кипения и понижение температуры замерзания растворов. Законы Рауля.
10. Свойства растворов электролитов. Теория электролитической диссоциация. Сильные и слабые электролиты. Степень электролитической диссоциации, константа диссоциации, их связь. Связь изотонического коэффициента со степенью диссоциации. Кажущаяся степень диссоциации сильных электролитов. Активность ионов. Произведение растворимости малорастворимых веществ.
11. Обменные реакции в растворах электролитов. Ионное произведение воды. Водородный показатель рН. Индикаторы. Гидролиз солей. Влияние различных факторов на гидролиз солей. Произведение растворимости малорастворимых веществ.
12. Химические источники электрического тока. ЭДС гальванического элемента. Восстановительные стандартные электродные потенциалы и их определение с помощью водородного электрода сравнения. Уравнение Нернста. Влияние концентрации, реакции среды на электродные потенциалы. Направление протекания окислительно-восстановительных процессов.
13. Электролиз. Электролиз расплавов и растворов. Законы электролиза. Электрохимический эквивалент. Электрохимическая коррозия.
14. Положение неметаллов в периодической системе, общая их характеристика. Водород, положение в периодической таблице. Его физические и химические свойства. Получение водорода в лаборатории и в технике. Его применение. Классы водородных соединений, свойства соединений.
15. Галогены. Их общая характеристика. Соединения галогенов в природе, их применение. Хлор. Его физические и химические свойства. Галогеноводороды, получение, свойства, применение. Соляная кислота и ее соли. Кислородные соединения галогенов: оксиды, кислоты, соли.
16. Общая характеристика элементов главной подгруппы VI группы периодической системы. Сера. Ее физические и химические свойства, аллотропия. Серная кислота, свойства и химические основы производства контактным способом. Кислород, физические и химические свойства, аллотропия. Получение кислорода в лаборатории и в промышленности. Роль кислорода в природе и применение в технике. Вода. Строение молекулы воды. Физические и химические свойства воды.
17. Общая характеристика элементов главной подгруппы V группы периодической системы. Азот, физические и химические свойства. Аммиак, промышленный синтез, физические и химические свойства аммиака. Соли аммония. Азотная кислота, соли азотной кислоты, азотные удобрения. Фосфор, аллотропные формы, физические и химические свойства. Оксид фосфора(V). Фосфорная кислота и ее соли, фосфорные удобрения.
18. Общая характеристика элементов главной подгруппы IV группы периодической системы. Химические свойства углерода, аллотропические формы. Оксиды углерода(II) и (IV), их химические свойства. Семейства угольной и синильной кислот, их соли. Кремний, физические и химические свойства. Оксид кремния(IV) и кремниевые кислоты, силикаты. Соединения кремния в природе. Их использование в технике.
19. Общая характеристика элементов главной подгруппы III группы периодической системы. Бор, получение, очистка, применение. Оксид бора, борные кислоты, полибораты.
20. Металлы. Их положение в периодической системе, физические и химические свойства. Электрохимический ряд напряжений металлов. Металлы и сплавы в технике. Основные способы получения металлов.
21. Общая характеристика p-металлов главных подгрупп III, IV, V групп системы.
22. Алюминий. Соединения алюминия в природе, получение, его роль в технике. Характеристика элемента и его соединений на основе положения в периодической системе и строения атома. Амфотерность оксида и гидроксида алюминия, соли алюминия. Общая характеристика элементов подгруппы галлия, свойства металлов, оксидов, гидроксидов. Соли трехвалентных элементов, их применение.
23. Германий, олово, свинец. Общая характеристика элементов, нахождение в природе, получение, свойства. Аллотропные модификации олова. Химические свойства германия, олова и свинца. Моно- и диоксиды германия, олова и свинца. Гидроксиды двух- и четырехвалентных соединений элементов, их получение и свойства. Гидролиз соединений германия, олова и свинца. Сопоставление кислотно-основных и окислительно-восстановительных свойств соединений элементов. Применение простых веществ и соединений**.**
24. Общая характеристика элементов подгруппы мышьяка. Свойства соединений трех- и пятивалентных сурьмы и висмута, их применение.
25. Общая характеристика d-металлов, положение их в периодической системе. Соединения элементов подгруппы меди и цинка. Получение соединений одно- и двухвалентной меди, их применение. Комплексные соединения меди(II). Оксид, гидроксид и соли цинка, их применение. Биологическая роль меди и цинка.
26. Элементы подгруппы титана, их оксиды, гидроксиды, галогениды; сульфаты титанила, цирконила. Получение, свойства, применение.
27. Общая характеристика соединений шестивалентных элементов подгруппы хрома: оксиды, гидроксиды, соли. Способность элементов образовывать изо- и гетерополисоединения, применение этих соединений.
28. Общая характеристика элементов подгруппы марганца. Соединения марганца в различных степенях окисления, сравнение кислотно-основных свойств их оксидов и гидроксидов, сравнение окислительно-восстановительных свойств. Применение соединений марганца, биологическая роль марганца.
29. Общая характеристика соединений двух- и трехвалентных элементов семейства железа: оксиды, гидроксиды, соли, комплексные соединения железа, кобальта, никеля. Биологическая роль железа и кобальта.
30. Общая характеристика f-элементов, положение их в периодической системе, электронное строение атомов. Лантаноиды, нахождение в природе, извлечение, получение индивидуальных редкоземельных элементов (РЗЭ). Проблема разделения РЗЭ. Изменение химических свойств с возрастанием порядкового номера, лантаноидное сжатие, степени окисления, координационные числа ионов. Физические и химические свойства соединений лантаноидов. Комплексные соединения.

**Рекомендованная литература для профиля подготовки 1.4.1. «Неорганическая химия»**

1. Ахметов Н.С. Общая и неорганическая химия. 3-е изд. М.: Высш. шк., 1998.
2. Карапетьянц М.Х., Дракин С.И. Общая и неорганическая химия. М.: Химия, 2001.
3. Коттон Ф., Уилкинсон Дж. Современная неорганическая химия. Т. 1—3. М.: Мир, 1969.
4. Суворов А.В., Никольский А.Б. Общая химия. М.: Мир, 1997.
5. Неорганическая химия / Ю.Д. Третьяков, Л.И. Мартыненко, А.Н. Григорьев, А.Ю. Цивадзе. Т. 1, 2. М.:Химия, 2001.
6. Хьюи Дж. Неорганическая химия: строение вещества и реакционная способность. М.: Химия, 1987.

**Дополнительная литература**

1. Гиллеспи Р., Харгиттаи И. Модель отталкивания электронных пар валентной оболочки и строение молекул. М.: Мир, 1992.
2. Джонсон Д. Термодинамические аспекты неорганической химии. М.: Мир, 1985.
3. Драго А. Физические методы в химии. Т. 1, 2. М.: Мир, 1981.
4. Карапетьянц М.Х., Дракин С.И. Строение вещества. М.: Высш. шк., 1978.
5. Костромина Н.А., Кумок В.Н., Скорик Н.А. Химия координационных соединений. М.: Высш. шк., 1990.
6. Кукушкин Ю.Н. Химия координационных соединений. М.: Высш. шк., 2001.
7. Некрасов Б.В. Основы общей химии. Т. 1, 2. М.: Химия, 1972-1973.
8. Пиментел Дж., Кунрод Дж. Возможности химии сегодня и завтра. М.: Мир, 1992.
9. Полторак О.И., Ковба Л.М. Физико-химические основы неорганической химии. М.: Изд-во МГУ, 1984.
10. Спицын В.И., Мартыненко Л.И. Неорганическая химия. Т. 1, 2. М.: Изд-во МГУ, 1991, 1994.
11. Турова Н.Я. Неорганическая химия в таблицах. М.: ВХК РАН, 1999.
12. Угай Я.А. Общая и неорганическая химия. М.: Высш. шк., 2001.
13. Уэллс А. Структурная неорганическая химия. Т. 1–3. М.: Мир, 1987.
14. Фримантл М. Химия в действии. Т. 1, 2. М.: Мир, 1991.

# **Научная специальность 1.4.4. «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. Основные квантово-механические представления об атомах (уравнение де Бройля, принцип Гейзенберга, волновая функция, уравнение Шредингера и результаты его решения для атома водорода и водородоподобных ионов).
4. Газы, жидкости, твердые тела, кристаллы. Пространственная решетка. Простейшие ионные, атомные и металлические решетки (решетка хлористого натрия, алмаза, кубические, гранецентрированные и плотноупакованные решетки).
5. 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.
6. Основные этапы развития представлений о катализе. Физические и химические теории катализа. Взаимодействие катализатора и реакционной среды. Дезактивация катализаторов. Нестационарный катализ.
7. Металлическая проводимость. Изоляторы и полупроводники. Уровень Ферми. Электронная и дырочная проводимость.
8. 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.
9. Термодинамические параметры. Теплота и работа. Внутренняя энергия и первое начало термодинамики. Уравнения состояния. Системы: открытые, закрытые и изолированные.
10. 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.
11. Гомогенные и гетерогенные системы. Химические переменные и число независимых реакций. Парциальные молярные величины компонентов. Химические потенциалы. Уравнения Гиббса-Дюгема. Правило фаз Гиббса.
12. Изохорная и изобарная теплоемкости. Температурная зависимость термодинамических свойств вещества. Третье начало термодинамики и абсолютные значения энтропии веществ. Уравнения Гиббса–Гельмгольца.
13. 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.
14. Уравнения состояния и термодинамический потенциал идеального газа. Стандартный термодинамический потенциал реального газа и летучесть. Фазовое равновесие в однокомпонентной системе, уравнение Клаузиуса–Клапейрона.
15. Энтропия смешения идеальных газов. Химический потенциал компонента идеальной газовой смеси. Изотерма химической реакции. Константа равновесия. Температурная зависимость константы равновесия — изобара Вант Гоффа.
16. 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.
17. 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.
18. 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.
19. Химический потенциал электролита в растворе: активности электролитов, среднеионные величины и стандартные значения. Водородная шкала. Зависимость коэффициента активности от ионной силы по теории Дебая – Хюккеля.
20. Кислотно - основное равновесие. Константа ионизации и константа основности. Ионное произведение воды. Концентрация ионов водорода (pH).
21. Коллигативные свойства растворов твердых нелетучих веществ в жидкости. Изменение температуры замерзания в растворах твердых нелетучих веществ в жидкости. Уравнение, описывающее зависимость понижения температуры замерзания от свойств раствора. Значение криоскопической постоянной и ее физический смысл. Влияние диссоциации на понижение температуры замерзания. Определение молярной массы твердых нелетучих веществ с помощью криоскопического метода.
22. Гальванические элементы. ЭДС и потенциалы электродов. Окислительно-восстановительное равновесие. Уравнение Нернста. Типы электродов. Водородный электрод. Стандартные электродные потенциалы и условные термодинамические функции ионов.
23. Поверхностное натяжение. Изотерма адсорбции Гиббса. Теплота и энтропия адсорбции. Изотерма Лэнгмюра. Полимолекулярная адсорбция паров — изотерма БЭТ.
24. Механизм химической реакции. Скорость химической реакции. Простые реакции. Закон действующих масс. Порядок реакции. Константа скорости химической реакции. Уравнение Аррениуса. Предэкспоненциальный множитель и энергия активации.
25. 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.
26. Кинетическое описание реакций в открытых системах. Реакторы полного перемешивания и идеального вытеснения.
27. Методы определения порядка реакции и кинетических констант из экспериментальных данных.
28. 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.
29. Кинетика реакций в жидкости. Диффузионно контролируемые. Клеточный эффект. Учет влияния среды.
30. Нетермическое инициирование химических реакций. Сопряженные реакции и химическая индукция. Фотохимические реакции. Основной фотохимический закон. Закон Бугера-Ламберта-Бэра. Квантовый выход.
31. 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.
32. Определение катализа и катализатора. Катализ и химическое равновесие. Классификация каталитических процессов. Промоторы и каталитические яды. Каталитическая активность и избирательность. Методы измерения.
33. Природа действия катализаторов. Факторы, определяющие скорость химического превращения. Понятие о каталитическом цикле.
34. Молекулярная кинетика химических реакций. Молекулярность реакции. Основные положения теории активных столкновений. Стерический фактор.

**Рекомендованная литература для профиля подготовки 1.4.4. «Физическая химия»**

1. Atkins P., de Paula J. Physical Chemistry. - 8th ed. - Oxford University Press, 2006.
2. Alberty R. A. Modern Physical Organic Chemistry. - New York: Springer, 2017.
3. Kollman P. A., Friesner R. A., Beard H. S. Introduction to modern NMR spectroscopy. - John Wiley & Sons, 2011.
4. Levine I. N. Quantum Chemistry. - Pearson Education, 2013.
5. Акулова. – СПб.: Лань, 2012. – 464 с. 2. Стромберг, А. Г. Физическая химия: Учеб. для вузов / А. Г. Стромберг, Д. П. Семченко; Под ред. А. Г. Стромберга. - 7-е изд., стер. - М.: Высшая школа, 2009. - 527 с. - ISBN 978-5-06-006161-1.
6. Теоретическая электрохимия: Учебник для вузов по направлению подготовки "Химическая технология" / А. Л. Ротинян [и др.]. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Студент, 2013. – 496 с. - ISBN 978-5-4363-0047-4.
7. Чоркендорф, Иб. Современный катализ и химическая кинетика / И. Чоркендорф, Х. Наймантсведрайт; пер. с англ. В. И. Ролдугина. – Долгопрудный : Интеллект, 2010. – 501 с. - ISBN 978-5-91559-044-0.
8. Бёккер, Ю. Спектроскопия / Ю. Бёккер; пер. с нем. Л. Н. Казанцевой, под ред. А. А. Пупышева, М. В. Поляковой. - М.: Техносфера, 2009. - 527 с. - ISBN 978-5-94836- 220-5

**Научная специальность 1.4.5. «Хемоинформатика»**

*Аспекты химических наук:*

1. Периодический закон Д.И. Менделеева. Периоды, группы и подгруппы, семейства элементов. Периодичность изменения свойств атомов, простых веществ и химических соединений по периодам и группам. Изменение валентности по периодам и группам.
2. Типы химических связей, их особенности и механизмы образования. Основные признаки и свойства ковалентной связи, насыщаемость связи, понятие валентности и направленность ковалентной связи. Теории ковалентной связи: теория валентных связей, теория молекулярных орбиталей. Гибридизация атомных орбиталей, пространственное строение молекул и ионов.
3. Характеристики ионной связи, отличие в свойствах соединений с ионной и ковалентной связью. Полярность связи. Металлическая и водородная типы связей. Связь в газообразных, жидких и твердых веществах.
4. Механизм химической реакции. Простые реакции. Влияние концентрации веществ, температуры, катализатора на скорость реакции. Закон действующих масс. Порядок реакции. Скорость химической реакции. Константа скорости химической реакции. Уравнение Аррениуса. Предэкспоненциальный множитель и энергия активации.
5. Кинетические уравнения и кинетические кривые для реакций 1-го, 2-го и 3-го порядков. Сложные обратимые, параллельные и последовательные реакции. Метод стационарных концентраций и квазиравновесное приближение. Лимитирующая стадия.
6. Силы межмолекулярного взаимодействия. Агрегатное состояние веществ с точки зрения их молекулярного строения. Строение веществ в конденсированном состоянии. Типы кристаллических решеток. Зависимость физических свойств веществ от их надмолекулярной структуры.
7. Комплексные соединения и пространственная конфигурация комплексных ионов. Классы комплексных соединений и изомерия. Характеристика химических связей в комплексных соединениях. Комплексообразование в растворах и устойчивость комплексных ионов.
8. Классификация органических низкомолекулярных соединений. Примеры простейших представителей основных классов. Функциональные атомы и группы, их химические свойства.
9. Синтетические органические, элементоорганические, неорганические и природные полимеры. Молекулярная масса, полидисперсность, степень полимеризации, молекулярно-массовое распределение высокомолекулярных соединений. Конфигурация и стереохимия полимеров.
10. Основные типы конформаций макромолекул. Модель свободно-сочленённой цепи. Гибкость макромолекул, гибкоцепные и жесткоцепные полимеры.
11. Механизмы полимеризации, поликонденсации и полиприсоединения. Радикальная и ионная полимеризации и их основные закономерности, и особенности. Кинетика радикальной полимеризации и уравнение скорости полимеризации. Факторы, влияющие на молекулярную массу и молекулярно-массовое распределение полимеров.
12. Особенности и основные закономерности химической модификации полимеров. Реакционная способность функциональных групп макромолекул и низкомолекулярных соединений. Влияние условий на кинетические закономерности и строение образующихся полимеров.
13. Многокомпонентные химические системы. Гомогенность и гетерогенность систем. Химические переменные и число независимых реакций. Парциальные молярные величины компонентов. Химические потенциалы. Правило фаз Гиббса.
14. Экспериментальные методы анализа реальных (природных) сред и природных химических систем. Основные подходы к фракционированию многокомпонентных систем и природных сред.

*Аспекты обработки, анализа данных, и компьютерного моделирования:*

1. Общие подходы к моделированию. Аналитические, имитационные, статистические методы построения моделей. Дискретно-вероятностные, дискретно-детерминированные, непрерывно-вероятностные, непрерывно-детерминированные.
2. Понятие “Система”. Классификация систем. Свойства систем. Жизненный цикл системы.
3. Природные системы. Технологические системы, полезная функция технологической системы.
4. Модель, как понятие. Виды моделей.
5. Компьютерные и математические модели. История первых моделей в химии.
6. Выборка, виды выборок, размер выборки, репрезентативная выборка.
7. Понятие многомерных данных, прямые и косвенные наблюдения, корреляция в исходных данных, полезная информация в данных.
8. Компьютерное моделирование биологических систем. Модели роста популяций.
9. Понятие компьютерного моделирования. Основные этапы компьютерного моделирования.
10. Основные понятия регрессионных методов построения моделей.
11. Основные понятия дисперсионных методов построения моделей.
12. Основные понятия дискриминантного анализа данных.
13. Метод главных компонент, как метод понижения размерности.
14. Проверка работоспособности модели, обучающий, проверочный и тестовый набор данных.
15. Оценка модели. Объясненная и остаточная дисперсия, среднеквадратичная ошибка моделирования, стандартная ошибка предсказания.
16. Основные задачи, которые решает анализ многомерных данных.

**Научная специальность 1.4.7. «Высокомолекулярные соединения**

**(Химия полимеров и полимерных композиционных материалов)»**

Высокомолекулярные соединения как наука, объектами исследований которой являются макромолекулы синтетического и природного происхождения, состоящие из многократно повторяющихся структурных единиц, соединенных химическими связями и содержащие в главной цепи атомы углерода, а также кислорода, азота и серы. Классификация и номенклатура мономеров, олигомеров и полимеров. Особенности их химического строения. Синтетические органические, элементоорганические, неорганические и природные полимеры, а также их смеси и полимерные композиционные материалы (ПКМ). Полидисперсность, молекулярная масса, степень полимеризации, молекулярно-массовое и молекулярно-численное распределения олигомеров и полимеров. Стереохимия полимеров. Аспекты синтеза высокомолекулярных соединений.

2. Реакции получения олигомеров и высокомолекулярных соединений.

2.1. Полимеризация и сополимеризация: радикальная, катионная, анионная и ионно-координационная, особенности указанных полимеризационных процессов. Полимеризация в растворе, в массе, в суспензии, в эмульсии, в твердой фазе. Термодинамика полимеризационных процессов.

2.2. Радикальная полимеризация и ее механизм. Методы инициирования. Кинетика радикальной полимеризации и уравнение скорости полимеризации. Влияние различных факторов на молекулярную массу и молекулярно-массовое распределение полимеров. Ингибиторы и регуляторы радикальной полимеризации. Радикальная полимеризация при глубоких степенях превращения. Гель-эффект. Способы проведения радикальной полимеризации: в массе, растворе, твердой фазе, в суспензиях.

2.3. Эмульсионная полимеризация и ее особенности. Кинетика и механизмы эмульсионной полимеризации.

2.4. Сополимеризация катионная и анионная, их механизмы и основные закономерности. Уравнение состава сополимера. Константы сополимеризации и их физический смысл. Связь строения мономеров с их реакционной способностью. Влияние среды, давления и температуры. Статистические, привитые и блок-сополимеры.

2.5. Ионная, катионная и анионная, полимеризация. Реакционная способность мономеров в ионных реакциях. Катализаторы и сокатализаторы. Механизмы процесса. Образование активного центра, рост и обрыв цепи. Скорости элементарных реакций. Примеры образования "живых" полимерных цепей.

2.6. Ионно-координационная полимеризация и ее особенности. Катализаторы Циглера-Натта. Металлоценовый катализ, механизм и кинетика реакций. Стереорегулярные полимеры и условия их получения. Механизм стереоспецифической полимеризации.

2.7. Полиприсоединение. Механизм образования полиуретанов, поликарбамидов и эпоксидных полимеров.

2.8. Поликонденсация: равновесная и неравновесная. Типы химических реакций поликонденсации. Функциональность мономеров, олигомеров и ее значение. Равновесная поликонденсация и ее механизм. Кинетика равновесной поликонденсации. Зависимость молекулярной массы полимера от соотношения исходных мономеров. Неравновесная поликондесация. Типы неравновесных реакций. Способы проведения неравновесной поликонденсации. Закономерности неравновесной поликонденсации. Межфазная поликонденсация. Механизм реакции и ее основные закономерности. Совместная поликонденсация и ее характерные особенности в случае равновесной и неравновесной поликонденсации. Трехмерная поликонденсация и ее закономерности. Влияние функциональности исходных соединений. Разнозвенность полимеров, получаемых методами поликонденсации.

3. Синтез мономеров и полисопряженных полимеров на их основе, химическое строение, молекулярная и надмолекулярная структура типичных полисопряженных полимеров: полиацетилена, полидиацетиленов, полианилинов, полифениленвиниленов,, политиофенов и др., понятие об их электронной структуре. Связь между методами их синтеза и строением.

4. Основные свойства разветвленных полимеров и методы синтеза, их конфигурация (на уровнях звена, цепи, присоединения звеньев, присоединения блоков) и конформация. Факторы, определяющие конформационные переходы. Структурная модификация и надмолекулярная структура. Сверхразветвленные полимеры и дендримеры, их синтез и особенности строения.

5. Сшитые полимеры. Типы сшитых полимеров. Формирование трехмерных структур в процессе синтеза и химических превращений в макромолекулах. Сшитые жесткоцепные и эластичные полимеры. Виды сшивающих агентов и особенности строения сеток. Влияние типа поперечных связей на механические свойства сшитых эластомеров.

6. Смеси полимеров. Механизм смешения и типы фазовых структур в смесях полимеров. Смеси полимеров как матрицы для получения ПКМ, специфика синтеза ПКМ с их применением. Многокомпонентные смеси полимеров.

7. Природные полимеры и их разновидности, методы выделения из природного сырья и идентификации, методы модификации. Целлюлоза, хитин, хитозан и их производные.

8. Химическая модификация полимеров. Основные закономерности модификации полимеров. Реакционная способность функциональных групп макромолекул и низкомолекулярных соединений. Влияние условий на кинетические закономерности и строение образующихся полимеров. Композиционная неоднородность. Реакции структурирования полимеров и их особенности. Изменение свойств полимеров в результате структурирования. Межмолекулярные реакции и образование трехмерных сеток.

9. Классификация полимерных композиционных материалов и полимерных нанокомпозитов. Виды материалов: полимер-полимерные смеси, ПКМ, армированные непрерывными, короткими волокнами и пластинчатыми наполнителями, дисперснонаполненные ПКМ, пенополимеры, многокомпонентные ПКМ. Волокнообразующие полимеры и волоконные полимерные композиты, методы получения и структура.Тип, форма и основные свойства армирующих наполнителей: непрерывные стеклянные, углеродные, борные, органические и др. волокна, нити, жгуты, ровинги, ленты и ткани; короткие волокна, маты из них; наполнители плоскостной структуры. Физико-химия поверхности наполнителей. Типы и свойства матриц (термопластичные и термореактивные полимеры, полимер-полимерные смеси). Методы получения полимерных композиционных материалов.

10. Межфазные явления на границах раздела полимер-полимер, полимер-твердое тело. Адгезия. Влияние формы, химического и физического состояния поверхности на свойства ПКМ. Аппреты. Методы химической и физической модификации компонентов ПКМ.

11. Нанокомпозиты. Типы ингредиентов, материалы и методы, применяемые для получения нанокомпозитов. Особенности их получения и основные свойства нанокомпозитов.

12. Основы технологии получения полимеров и полимерных композиционных материалов. Методы получения наполнителей, их фракционирование и обработка, способы совмещения функциональных ингредиентов и полимерных матриц. Традиционные и новые области применения олигомеров, полимеров, ПКМ и нанокомпозитов при решении научных и технических задач.

13. Деструкция полимеров и композиционных материалов. Основные виды деструкции: химическая, термическая, термоокислительная, фото- и механическая. Старение полимеров. Стабилизация высокомолекулярных соединений. Кинетика механодеструкции полимеров. Предел механодеструкции и причины его существования.

14. Горючесть полимеров и ПКМ. Основные процессы, протекающие при горении в конденсированной и газовой фазах. Методы снижения и повышения горючести.

15. Вторичная переработка полимеров и ПКМ, основные тенденции и современное состояние.

**Рекомендованная литература для профиля подготовки 1.4.7. «Высокомолекулярные соединения»**

1. Семчиков Ю.Д. Высокомолекулярные соединения. Учебник. М.: Академия, 2010, 368 с.
2. Стрепихеев А.А.,Деревицкая В.А., Слонимский Г.Л. Основы химии высокомолекулярных соединений. М.: Химия. 1976.
3. Шур A.M. Высокомолекулярные соединения. М.: Высшая школа. 1981.
4. Тагер А.А. Физико-химия полимеров. 4-е изд., перераб. и доп. Учеб. пособие для хим. фак. ун-тов. М.: Научный мир, 2007, 573 с.
5. Виноградова С.В., Васнев В.А., Поликонденсационные процессы и полимеры. М.: Наука. 2000.
6. Помогайло А.Д., Розенберг А.С., Уфлянд И.Е. Наночастицы металлов в полимерах. М.: Химия. 2000.
7. Тугов И.И., Кострыкина Г.И. Химия и физика полимеров. М.: Химия. 1989.
8. Федтке М. Химические реакции полимеров, М.: Химия. 1989.
9. Платэ Н.А., Васильев А.Е. Физиологически активные полимеры. М.: Химия. 1986.
10. Платэ Н.А. Макромолекулярные реакции. М.: Химия, 1977.
11. Хохлов А.Р., Кучанов С.И. Лекции по физической химии полимеров. М.: Мир. 2000.
12. Кулезнев В.Н., Шершнев В.А. Химия и физика полимеров. М.: Высшая ш кола. 1988.
13. Иванчев С.С. Радикальная полимеризация. Л. Химия. 1985.
14. Практикум по химии и физике полимеров. Под ред. Куренкова В.Ф. М. Химия. 1995.
15. Марк. Дж., Эрман Б., Эйрич Ф. Каучук и резина. Наука и технологии. Долгопрудный: Интеллект. 2011.
16. Платэ Н.А., Литманович А.Д., Кудрявцев Я.В. Макромолекулярные реакции в расплавах и смесях полимеров. М.: Наука. 2008.
17. Помогайло А.Д., Розенберг А.С., Уфлянд И.Е. Наночастицы металлов в полимерах. М.:Химия. 2000.
18. Фракционирование полимеров. Под ред. М. Кантова. М.: Мир. 1971.

**Научная специальность 1.4.7. «Высокомолекулярные соединения**

**(Физика полимеров и полимерных композиционных материалов)»**

Конформационная статистика полимерных цепей. Конфигурация и конформация макромолекул. Основные модели полимерных цепей: свободно-сочлененная цепь, цепь с фиксированными углами. Характеристики размеров и формы полимерных цепей. Внутреннее вращение и поворотная изомерия. Конформация макромолекул и конформационная энергия. Стереорегулярность и микроструктура цепных молекул. Гибкость полимерных цепей и ее характеристики. Термодинамическая и кинетическая гибкость макромолекул. Ближние и дальние взаимодействия. Размеры и формы реальных цепных молекул, и их экспериментальное определение. Понятие о статистическом сегменте. Теплофизические, физико-механические, оптические и физико-химические свойства высокомолекулярных соединений, их смесей и ПКМ.

1. Высокомолекулярные соединения в растворе. Характер взаимодействия в растворах полимеров. Термодинамика растворов полимеров. Теория Флори-Хаггинса. Объемные эффекты. Концентрированные растворы полимеров. Фазовые диаграммы полимер- растворитель. Гидродинамические свойства макромолекул в растворе. Диффузия макромолекул в растворе. Методы фракционирования полимеров. Растворы полиэлектролитов. Иономеры.
2. Физические и фазовые состояния полимеров: стеклообразное, высокоэластическое и вязкотекучее. Аморфные и кристаллические полимеры. Фазовые переходы, механизм кристаллизации и плавления кристаллов.
3. Структура и свойства полимерных стекол. Современные представления об аморфном состоянии и структуре стеклообразных полимеров. Стеклование полимеров и методы его определения. Явление вынужденной эластичности.
4. Высокоэластическое состояние. Основные свойства высокоэластического состояния полимеров. Статистическая теория деформации макромолекул. Сеточная теория высокоэластичности. Основное уравнение кинетической теории высокоэластичности. Термодинамика деформации эластомеров. Термоупругая инверсия. Тепловые эффекты при деформации. Кристаллизация эластомеров при деформации.
5. Вязкотекучее состояние и основы реологии полимеров. Закономерности течения расплавов полимеров, кривые течения, закон течения, механизм течения. Энергия и энтропия вязкого течения, их зависимость от параметров молекулярной структуры и от напряжения сдвига. Ньютоновская вязкость, методы определения и зависимость от молекулярной структуры и молекулярной массы полимера, температуры. Уравнение Вильямса-Ландела- Ферри.
6. Структура и свойства кристаллических полимеров. Условия образования кристаллического состояния в полимерах. Основные типы кристаллических структур макромолекул. Упаковка цепных молекул в кристаллах. Морфология кристаллических полимеров. Ламеллярные кристаллы. Сферолиты. Кристаллы с выпрямленными цепями. Степень кристалличности и методы ее определения. Кристаллизация и плавление полимеров, методы исследования. Кинетическая теория кристаллизации. Отжиг полимеров.
7. Жидкокристаллическое состояние полимеров. Ближний и дальний порядок. Типы симметрии. Мезоморфные состояния.
8. Ориентированное состояние полимеров. Особенности ориентированного состояния полимеров. Строение и свойства ориентированных полимеров. Основные методы ориентации полимеров и методы оценки.
9. Моделирование молекулярной и надмолекулярной структур олигомеров, полимеров и сополимеров в растворах, расплавах и полимерных твердых тел в аморфном, полукристаллическом кристаллическом состояниях.
10. Релаксационные явления в полимерах. Релаксационный характер процессов деформации. Гистерезисные процессы. Ползучесть и релаксация напряжения. Принцип суперпозиции. Спектр времен релаксации и запаздывания. Динамические свойства полимеров: комплексный модуль и комплексная податливость. Соотношение между комплексным и релаксационным модулями. Линейная вязкоупругость. Принцип температурно- временной эквивалентности.
11. Физико-механические свойства полимеров. Деформационные свойства. Напряжение, деформация и упругость. Обобщенная форма закона Гука. Идеальное пластическое тело, процесс развития пластических деформаций. Влияние гидростатического давления, температуры и скорости деформации на предел текучести. Межатомное взаимодействие в полимерах. Динамика и энергетика растяжения отдельной межатомной связи и цепной макромолекулы. Понятие о теоретической прочности полимеров. Основные теории прочности: Орована, Гриффитса, термофлуктациоиная, релаксационная. Долговечность. Кинетическая теория разрушения. Особенности разрушения твердых полимеров и эластомеров. Механизм пластического и хрупкого разрушения. Распространение трещин.
12. Электрические, оптические и магнитные свойства полимеров и ПКМ. Линейные и нелинейные эффекты в полимерах и полимерных композитах. Электрические свойства полимеров-диэлектриков и полимеров- проводников. Диэлектрическая поляризация и дипольные моменты полимеров. Диэлектрическая проницаемость и диэлектрические потери, электрическая прочность полимеров и ПКМ. Электризация полимеров и электрический пробой.
13. Допирование полисопряженных полимеров. Электрические и оптические свойства полисопряженных полимеров. Перспективы использования полисопряженных полимеров для создания полимерной электроники, включающей высокопроводящие, полевые, электролюминесцентные, нелинейно-оптические элементы и устройства
14. Магнетосопротивление полимеров и ПКМ. ПКМ с высокими и низкими значениями комплексной диэлектрической и магнитной проницаемостей, связь между составом и структурой, методы определения.
15. Оптические свойства полимеров: коэффициент светопропускания, спектральный коэффициент пропускания, светостойкость, светорассеяние, показатель преломления и оптический коэффициент напряжения и оптическая нетермостойкость. Факторы, определяющие уровень этих показателей. Старение оптических полимеров.
16. Теплофизические свойства полимеров и ПКМ. Плотность полимеров. Особенности теплового расширения полимеров. Теплоемкость. Теплопроводность и температуропроводность полимеров и ПКМ. Модели транспортных процессов. Влияние основных параметров полимеров и других ингредиентов ПКМ на их теплофизические свойства.
17. Трение и износ полимеров. Особенности трения полимеров. Природа и механизм трения. Закон трения, влияние времени контакта, скорости скольжения и температуры. Износ полимеров. Связь явлений трения и износа.
18. Проницаемость полимеров. Газопроницаемость полимеров. Диффузия в полимерах. Сорбция газов и паров. Ионный обмен. Селективная проницаемость полимерных материалов, методы определения.
19. Термодинамика совместимости полимеров. Фазовая структура и морфология. Микромеханика смесей полимеров. Деформация и разрушение твердых тел на основе полимерных смесей.
20. Межфазные явления на границах раздела полимер-полимер, полимер-твердое тело. Адгезия. Термодинамика взаимодействия компонентов в полимерных смесях и ПКМ. Структура и свойства межфазных слоев.
21. Физические свойства ПКМ. Прочность, вязкость разрушения, усталостная выносливость. Упругие и вязкоупругие свойства ПКМ. Модели, описывающие зависимость модуля упругости ПКМ от характеристик компонентов.
22. Тепловое расширение, тепло- и электропроводность ПКМ. Особенности зависимостей физических свойств ПКМ от типа наполнителя и распределения наполнителей в композиционном материале.
23. Нанокомпозиты. Наполнители с нанометровым размером частиц. Структура и свойства нанокомпозитов. Нанокомпозиты с новыми оптическими, электронными, магнитными, электрическими и др. функциями с применением углеродных нанотрубок, фуллеренов, металлов и оксидов металлов.
24. Понятие о применении полимеров и ПКМ в функциональных и интеллектуальных (smart) структурах. Полимерные материалы, применяемые для их получения: связь между их компоновкой, внешними воздействиями и откликом. Термо– и фотохромные, химотронные, тензочувствительные и др. материалы для интеллектуальных структур.

**Рекомендованная литература для профиля подготовки 1.4.7. «Высокомолекулярные соединения (Физика полимеров и полимерных композиционных материалов)»**

1. Тагер А.А. Физико-химия полимеров. 4-е изд., перераб. и доп. Учеб. пособие для хим. фак. ун-тов. М.: Научный мир, 2007, 573 с.
2. Семчиков Ю.Д. Высокомолекулярные соединения. Учебник. М.: Академия, 2010, 368 с.
3. Гуль В.Е., Кулезнев В.Н. Структура и механические свойства полимеров. М.: Высшая школа. 1979.
4. Бартенев Г.М. Прочность и разрушение полимеров. М.: Химия. 1984.
5. Вундерлих Б. Физика макромолекул. М.: Мир. 1978.
6. Уорд И. Механические свойства твердых полимеров. М.: Химия. 1974.
7. Годовский Ю.К. Теплофизика полимеров. М.: Химия. 1983.
8. Виноградов Г.В., Малкин А.Я. Реология полимеров. М.: Химия. 1977.
9. Нильсен Л. Механические свойства полимеров и полимерных композиций. М.: Химия.1978.
10. Кулезнев В.Н. Смеси полимеров. М.: Химия. 1980.
11. Киреев В.В. Высокомолекулярные соединения. М.: Высшая школа. 1992.
12. Моравец Г. Макромолекулы в растворе. М.: Мир. 1987.
13. Аскадский А.А., Хохлов А.Р. Введение в физико-химию полимеров. М.: Научный мир. 2009.
14. Баженов С.Л., Берлин А.А., Кульков А.А., Ошмян В.Г. Полимерные композиционные материалы. Прочность и технология. Долгопрудный: Интеллект. 2010.
15. Вундерлих Б. Физика макромолекул в 3т. М.: Мир. 1т – 1976; 2т – 1979; 3т – 1984.
16. Волынский А.Л., Бакеев Н.Ф. Структурная самоорганизация аморфных полимеров. М.: Физматлит. 2005.
17. Годовский Ю.К. Теплофизика полимеров. М.: Химия. 1982.
18. Гросберг А.Ю., Хохлов А.Р. Полимеры и биополимеры с точки зрения физики. Долгопрудный: Интеллект. 2010.

**Дополнительная литература**

1. Тугов И.И., Кострыкина Г.И. Химия и физика полимеров. М.: Химия. 1989.
2. Кауш Г. Разрушение полимеров. М.: Мир. 1981.
3. Вольфсон С.А., Берлин А.А., Ошмян В.Г., Ениколопов Н.С. Принципы создания композиционных полимерных материалов. М.: Химия. 1990.
4. Энциклопедия полимеров. М.: Сов. Энциклопедия. 1 –3 тт. 1972-1978.
5. Бартенев Г.Н., Бартенева А.Г. Релаксационные свойства полимеров. М.: Химия. 1992.
6. Привалко В.П. Молекулярное строение и свойства полимеров. Л.: Химия. 1986.
7. Тюдзе Р., Каваи Т. Физическая химия полимеров. М.: Химия. 1977.

**Научная специальность 1.4.7. «Высокомолекулярные соединения**

**(Методы исследования полимеров и полимерных композиционных материалов)»**

1. Особенности применения физических методов для изучения структуры и свойств олигомеров, полимеров, полимерных материалов и полимерных композитов. Методы обработки экспериментальных данных: и определение достоверности полученных результатов: доверительный интервал, относительная и абсолютная погрешности измерений.
2. Экспериментальные методы исследования структуры макромолекул в растворе (вискозиметрия, светорассеяние, седиментация, двойное лучепреломление).
3. Спектроскопия полимеров: ИК, МНПВО, КР. Специфика методов и задачи, решаемые с их применением.
4. Флуоресцентный анализ полимеров.
5. Электронный и ядерный парамагнитный резонансы. Сущность методов, аппаратура, области применения. Метод спиновой метки. ЯМР высокого и низкого разрешения.
6. Теплофизические методы. Дилатометрия. Дифференциальный термический анализ. Калориметрические методы.
7. Macс-спектрометрия. Сущность метода, аппаратура, области применения. Время-пролетная масс-спектрометрия.
8. Рентгеноструктурный анализ полимеров. Изучение размеров и ориентации упорядоченных областей кристаллических полимеров. Большие периоды в полимерах. Специфика исследования смесей полимеров и ПКМ.
9. Оптическая и электронная микроскопия.
10. Физико-механические методы. Термомеханический метод.
11. Неразрушающие методы исследования ПКМ.
12. Динамические методы. Диэлектрическая и механическая спектроскопия.
13. Электрофизические методы исследования свойств полимеров и ПКМ.
14. Туннельная микроскопия.
15. Полярография и другие электрохимические методы.
16. Транспортные методы для исследования полимеров. Обращенная и гель-проникающая хроматография.
17. Особенности методов исследования нанокомпозитов и их компонентов.

**Рекомендованная литература для научной специальности 1.4.7. «Высокомолекулярные соединения (Методы исследования полимеров и полимерных композиционных материалов)»**

1. Семчиков Ю.Д. Высокомолекулярные соединения. Учебник. М.: Академия, 2010, 368 с.
2. Гуль В.Е., Кулезнев В.Н. Структура и механические свойства полимеров. М.: Высшая школа. 1979.
3. Годовский Ю.К. Теплофизика полимеров. М.: Химия. 1983.
4. Виноградов Г.В., Малкин А.Я, Реология полимеров М.: Химия. 1977
5. Нильсен Л. Механические свойства полимеров и полимерных композиций. М.: Химия.1978.
6. Драго Р. Физические методы в химии. М.: Мир. 1-2 тт. 1981.

 **Дополнительная литература**

1. Тагер А.А. Физико-химия полимеров. 4-е изд., перераб. и доп. Учеб. пособие для хим. фак. ун-тов. М.: Научный мир, 2007, 573 с.
2. Киреев В.В. Высокомолекулярные соединения. М.: Высшая школа. 1992.
3. Аналитическая химия полимеров. М. 1-3 кн. 1963-1966
4. Энциклопедия полимеров. М.: Сов. Энциклопедия. 1–3 тт. 1972-1978