

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Томский государственный педагогический университет»
(ТГПУ)

УТВЕРЖДЕНО
на заседании Ученого Совета

“ 28 ” 12 2012 г.

Председатель Ученого Совета,

ректор ТГПУ  В.В.Обухов

П Р О Г Р А М М А
государственного экзамена
«Физическая химия»

Направление 020100 Химия
Магистерская программа – Физическая химия
Степень (квалификация) – магистр

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Программа государственного экзамена по физической химии составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования по направлению 020100 Химия, степень (квалификация) – магистр и учебным планом по направлению 020100.68 Химия, магистерская программа Физическая химия.

Настоящая программа включает в себя перечень вопросов из следующих дисциплин: «Термодинамические расчеты в химии», «Кинетика сложных химических реакций», «Химия высоких энергий», «Использование полуэмпирических и квантово-химических методов расчета в химии», «Нанохимия», «Физико-химические методы анализа», «Физико-химические основы электрохимии», «Физико-химические основы экстракционных процессов».

Перечень вопросов настоящей программы соответствует требованиям к уровню подготовки магистра по направлению 020100 Химия.

Государственный экзамен предназначен для объективной оценки компетенций выпускника, установленных Федеральным государственным образовательным стандартом высшего профессионального образования.

ТРЕБОВАНИЯ К УРОВНЮ ПОДГОТОВКИ МАГИСТРА ПО НАПРАВЛЕНИЮ 020100 ХИМИЯ (ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ)

Магистр подготовлен к участию в исследованиях химических процессов, идущих в природных явлениях и проводимых в лабораторных условиях, выявлению общих закономерностей их протекания и возможности управления ими.

Магистр готовится к следующим видам профессиональной деятельности: научно-исследовательская; научно-педагогическая; организационно-управленческая.

Выпускник, получивший степень (квалификацию) магистра, должен быть готов к решению следующих профессиональных задач в соответствии с профильной направленностью ООП магистратуры и видами профессиональной деятельности:

- сбор и анализ литературы по заданной тематике;
- планирование постановки работы и самостоятельный выбор метода решения задачи;
- анализ полученных результатов и подготовка рекомендаций по продолжению исследования;
- подготовка отчета и возможных публикаций;
- организация научного коллектива и управление им для выполнения задачи;
- проведение научно-педагогической деятельности в вузе или в образовательном учреждении среднего профессионального образования (подготовка учебных материалов и проведение теоретических и лабораторных занятий).

ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ОСНОВНОЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ МАГИСТРАТУРЫ

Выпускник должен обладать следующими общекультурными компетенциями:

- способностью ориентироваться в условиях производственной деятельности и адаптироваться в новых условиях (ОК-1);
- умением принимать нестандартные решения (ОК-2);
- владением иностранным (прежде всего английским) языком в области профессиональной деятельности и межличностного общения (ОК-3);
- пониманием философских концепций естествознания, роли естественных наук (химии в том числе) в выработке научного мировоззрения (ОК-4);
- владением современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе,

обработке, хранении и передачи информации при проведении самостоятельных научных исследований (ОК-5);

пониманием принципов работы и умением работать на современной научной аппаратуре при проведении научных исследований (ОК-6);

Выпускник должен обладать следующими профессиональными компетенциями:

в научно-исследовательской деятельности:

наличием представления о наиболее актуальных направлениях исследований в современной теоретической и экспериментальной химии (синтез и применение веществ в наноструктурных технологиях, исследования в экстремальных условиях, химия жизненных процессов, химия и экология и другие) (ПК-1);

знанием основных этапов и закономерностей развития химической науки, пониманием объективной необходимости возникновения новых направлений, наличием представления о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, форм и методов научного познания, их роли в общеобразовательной профессиональной подготовке химиков (ПК-2);

владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии (в соответствии с темой магистерской диссертации) (ПК-3);

умением анализировать научную литературу с целью выбора направления исследования по предлагаемой научным руководителем теме и самостоятельно составлять план исследования (ПК-4);

способностью анализировать полученные результаты, делать необходимые выводы и формулировать предложения (ПК-5);

наличием опыта профессионального участия в научных дискуссиях (ПК-6);

умением представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати) (ПК-7);

в научно-педагогической деятельности:

пониманием принципов построения преподавания химии в образовательных учреждениях высшего профессионального образования (ПК-8);

владением методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных учреждениях высшего профессионального образования (ПК-9);

в организационно-управленческой деятельности:

способностью определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения (ПК-10);

владением основами делового общения, имеет навыки межличностных отношений и способен работать в научном коллективе (ПК-11);

пониманием проблемы организации и управления деятельностью научных коллективов (ПК-12).

ПЕРЕЧЕНЬ ВОПРОСОВ ПО НАПРАВЛЕНИЮ ПОДГОТОВКИ

1. Определение изменений энтальпии и энтропии сублимации, испарения и плавления по линейной зависимости логарифма давления пара над твердой и жидкой фазами от обратной температуры ($\ln p = a + b \frac{1}{T}$).
2. Расчет абсолютного значения энтропии графическим интегрированием по методу трапеций функций вида $\int_{T_1}^{T_2} \frac{C_p}{T} dT$ и $\int_{T_1}^{T_2} C_p d \ln T$.
3. Расчет энергии и энтропии связи двухатомных молекул по температурной зависимости изменения энергии Гиббса в процессе диссоциации молекул на атомы.
4. Вычисление энтальпий реакций по энергиям связи.
5. Определение параметров уравнения температурной зависимости теплоемкости вида $C_p = a + bT$ по экспериментальным данным методом наименьших квадратов.
6. Объекты нанохимии: кластеры, наночастицы, наноструктуры, структуры с квантоворазмерным эффектом (квантовые ямы, квантовые нити, квантовые точки).
7. Влияние размеров полупроводниковых наночастиц на их оптические и люминесцентные характеристики. Механизм влияния.
8. Фотокаталитические процессы с участием полупроводниковых наноструктур.
9. Квантовые размерные эффекты в наносистемах: изменение электронных и термодинамических свойств вещества.
10. Квантовые основы электроники (квантовое ограничение, интерференционные эффекты и тунелирование). Нанoeлектронные элементы информационных систем.
11. Классификация методов синтеза наночастиц. Химические методы синтеза («снизу вверх»). Методы визуализации и исследования наночастиц.
12. Диаграмма энергетических уровней и электронные спектры поглощения атомов, кластеров и наночастиц металлов. Проявление размерного эффекта.
13. Фуллерен C_{60} : получение, строение, свойства и его аналоги. Основные виды производных фуллеренов.
14. Углеродные нанотрубки: получение, строение, свойства и применение.
15. Наноматериалы в топливных элементах. Использование наноматериалов для хранения водорода.
16. Магнитные наноматериалы.
17. Нанотехнологии в медицине.

18. Принципиальные особенности поглощения энергии в радиационной химии и фотохимии. Первичные продукты радиационно-химических и фотохимических процессов: положительные ионы, электроны и возбужденные состояния, промежуточные и стабильные продукты процессов.
19. Энергетическая шкала в химии. Термическая химия и химия высоких энергий (термодинамические аспекты).
20. Временная шкала радиационно-химических и фотохимических процессов. Общие стадии и особенности. Представления о трех стадиях радиационно-химических процессов.
21. Особенности радиационно-химических и фотохимических превращений макромолекул. «Макромолекулярный эффект». Сшивание и деструкция полимеров.
22. Механизм радиоллиза воды. Радикальные и молекулярные продукты радиоллиза.
23. Количественные характеристики экстракции, Закон распределения Нернста. Термодинамическая и реальная константы распределения. Коэффициент распределения. Степень извлечения. Однократная и многократная экстракция.
24. Катионообменная и анионообменная экстракция. Количественные закономерности.
25. Координационная экстракция. Экстракция внутрикомплексных соединений. Количественные закономерности.
26. Экстракция по механизму физического распределения. Влияние природы экстрагента, температуры, pH водной фазы. Эффекты высаливания и всаливания.
27. Экстракция макроциклическими экстрагентами. Краун-эфир. Параметры, определяющие селективность макроциклических экстрагентов.
28. Уравнение Нернста. Электроды первого рода. Газовые электроды.
29. Электроды второго рода. Электроды сравнения. Электроды третьего рода.
30. Электролиз в растворах и расплавах. Законы Фарадея.
31. Электрохимические системы без химической реакции. Амальгамные электрохимические системы. Электрохимические системы с газовыми электродами. Электрохимические системы с различной концентрацией электролитов.
32. Электрохимические системы с химической реакцией. Простые электрохимические системы. Сложные электрохимические системы.
33. Потенциометрия. Определение произведения растворимости малорастворимых солей. Определение констант устойчивости комплексных соединений.
34. Сопряженные реакции: понятие индуктора, актора, акцептора. Схема протекания сопряженной реакции. Фактор индукции.

35. Фотохимические реакции: основные законы фотохимии. Скорость фотохимической реакции. Понятие о квантовом выходе.
36. Отличительные особенности гетерогенных процессов. Кинетическая и диффузионная области протекания гетерогенных процессов. Первое и второе уравнение Фика.
37. Кинетика топокхимических реакций. Уравнение Ерофеева.
38. Разветвленные цепные реакции (с сильно разветвленными, слабо разветвленными и вырожденными цепями). Цепной взрыв, верхний и нижний пределы воспламенения.
39. Формальная кинетика элементарных гомогенных односторонних реакций второго порядка с неравными начальными концентрациями реагентов.
40. Теории химической кинетики: активных столкновений, активированного комплекса.
41. Порядок реакции по компоненту и общий порядок реакции. Методы определения порядка реакции.
42. Теория активных ансамблей в гетерогенном катализе.
43. Односторонние последовательные реакции. Метод квазистационарных концентраций.
44. Слитный и раздельный механизмы протекания каталитических реакций.
45. Теории хроматографической колонки (кинетическая, теория тарелок).
46. Классификация методов вольтамперометрического анализа и их краткая характеристика.
47. Ионнообменная хроматография.
48. Классификации методов хроматографии. Типы и основные параметры детекторов.
49. Газо-адсорбционная хроматография. Выбор условий опыта.
50. Хроматографический пик и элюционные характеристики.
51. Ионметрия. Ионоселективные электроды. Стекланный электрод.
52. Абсолютные и дифференциальные фотометрические методы определения веществ.
53. Кулонометрия и кулонометрическое титрование.
54. Происхождение атомных и молекулярных спектров. Классификация спектроскопических методов анализа.
55. Природа химической связи в комплексных соединениях. Метод валентных связей, теория кристаллического поля, метод поля лигандов.
56. Канонические молекулярные орбитали.
57. Приближение Борна-Оппенгеймера. Его значение для квантовой химии.
58. Приближение линейной комбинации атомных орбиталей (МО ЛКАО).
59. Приближенные аналитические функции атомных орбиталей. Функции гауссовского типа и атомные орбитали Слетера-Зенера.
60. Метод самосогласованного поля Хартри. Метод Хартри-Фока

РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

Основная:

1. Аналитическая химия и физико-химические методы анализа: Учебник для вузов: в 2 т., Т.1. /Ю. М. Глубоков, В. А. Головачева, В. И. Дворкин и др. ; под ред. А. А. Ищенко. - М. : Академия, 2010. - 351 с.
2. Аналитическая химия и физико-химические методы анализа: Учебник для вузов: в 2 т., Т.2. / Н. В. Алов, И. А. Василенко, М. А. Гольдштрах и др. ; под ред. А. А. Ищенко.- М.: Академия, 2010.- 411 с.
3. Полещук, О. Х. Компьютерное моделирование химических реакций : учебное пособие, Часть 1 / О. Х. Полещук, под ред. В. Д. Филимонова – Томск : Изд-во ТГПУ, 2007. – 176 с.
4. Полещук, О. Х. Компьютерное моделирование химических реакций : учебное пособие, Часть 2 / О. Х. Полещук, Д. М. Кижнер. – Томск : Изд-во ТГПУ, 2009. – 156 с.

Дополнительная:

1. Будников, Герман Константинович и др. Основы современного электрохимического анализа : Учебное пособие для вузов / Г. К. Будников, В. Н. Майстренко, М. Р. Вяселев.- М. : Мир, 2003. - 591 с.
2. Краснов, К. С. Физическая химия. В 2 кн. Кн. 2. Электрохимия. Химическая кинетика и катализ: Учеб.для вузов / К. С. Краснов и др. ; под ред. К. С. Краснова. – 3-е изд., испр. - М. : Высш. шк., 2001 – 319 с.
3. Основы аналитической химии: В 2 кн., Кн 1. Общие вопросы. Методы разделения: Учебник для вузов / Т. А. Большова, Г. Д. Брыкина, А. В. Гармаш [и др.] ; под ред. Ю. А. Золотова.- Изд. 3-е, перераб. и доп.- М.: Высшая школа, 2004.- 361 с.
4. Полещук, О. Х. Лабораторные работы по компьютерному моделированию химических реакций : методические указания, Часть 1 / О. Х. Полещук, Д. М. Кижнер / под ред. В. Д. Филимонова – Томск : Изд-во ТГПУ, 2007. – 172 с.
5. Полещук, О. Х. Лабораторные работы по компьютерному моделированию химических реакций : учебно-методическое пособие, Часть 2 / О. Х. Полещук, Д. М. Кижнер. – Томск : Изд-во ТГПУ, 2007. – 160 с.
6. Стромберг, А. Г. Физическая химия / А. Г. Стромберг, Д. П. Семченко;Под ред. А. Г. Стромберга.-5-е изд., испр. - М. : Высшая школа, 2003. – 527 с.
7. Харитонов, Ю. Я Аналитическая химия (аналитика): В 2 книгах: Учебник для вузов/ Ю. Я. Харитонов.- 2-е изд., испр.- М.: Высшая школа. Кн. 2: Количественный анализ. Физико-химические (инструментальные) методы анализа.-2003.-558 с.
8. Харитонов, Ю. Я. Аналитическая химия : В 2 книгах: Учебник для вузов/ Ю. Я. Харитонов.- М.: Высшая школа. Кн. 1: Общие теоретические основы. Качественный анализ. - 2001.- 615 с.

КРИТЕРИИ ОЦЕНОК ЗА ЭКЗАМЕНЫ

Оценка «отлично» выставляется за ответ, если студент продемонстрировал глубокие исчерпывающие знания всего программного материала, понимание сущности и взаимосвязи рассматриваемых процессов и явлений, твердое знание основных понятий; логически последовательные, содержательные, полные ответы на все вопросы экзаменационного билета.

Оценка «хорошо» выставляется за ответ, если студент продемонстрировал твердые и достаточно полные знания всего программного материала, правильное понимание сущности и взаимосвязи рассматриваемых процессов и явлений.

Оценка «удовлетворительно» выставляется за ответ, если студент знает основной материал, но испытывает трудности в его самостоятельном воспроизведении, ориентируется в вопросах посредством дополнительных вопросов членов комиссии; не совсем понимает сущность излагаемого материала; допускает неточности; нарушает логику выстраивания ответа.

Оценка «неудовлетворительно» выставляется за ответ, если студент дал неправильный ответ на два основных вопроса; имеет слабые отрывочные знания; допустил грубые ошибки, не понимает сущности излагаемого материала.

Программа составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего профессионального образования по направлению 020100 «Химия».

Программу составили:

д.х.н., профессор кафедры неорганической химии

 Еремин Л.П.

д.х.н., профессор, зав. кафедрой неорганической химии

 Ковалева С.В.

д.х.н., профессор, зав. кафедрой органической химии

 Полещук О.Х.

Программа утверждена на заседании кафедры неорганической химии
от 30.08.2012, протокол № 1

Заведующий кафедрой
неорганической химии



С.В. Ковалева

Программа утверждена на заседании кафедры органической химии
от 30.08.2012, протокол № 1

Заведующий кафедрой
органической химии



О.Х. Полещук

Программа одобрена методической комиссией биолого-химического факультета

Председатель методической

комиссии биолого-химического факультета



Е.П. Князева

Программа одобрена на заседании Ученого совета биолого-химического факультета от 12.11.2012 протокол № 3

Председатель Ученого совета,
декан БХФ



В.А. Дырин

Согласовано:

Проректор по УР



В.Я. Эпп

Проректор по НОУД

О.А. Швабауэр

Директор УД



И.Г. Санникова