

«УТВЕРЖДЕНО»

Председатель экзаменационной комиссии
по проведению вступительных испытаний
в аспирантуру НИЦ «Курчатовский институт»
в форме вступительного экзамена и собеседования
по специальной дисциплине по группе научных
специальностей 1.4. Химические науки

д-р хим. наук, профессор, член-корреспондент РАН

_____ С.Н. Чвалун

«_____» _____ 2025 г.

**Программа
вступительного испытания
в аспирантуру НИЦ «Курчатовский институт»
по специальной дисциплине в форме вступительного экзамена
по группе научных специальностей 1.4. Химические науки
Научные специальности
1.4.1. Неорганическая химия
1.4.4. Физическая химия**

1. Общие положения

1.1. Данная программа предназначена для подготовки к вступительным испытаниям в аспирантуру по специальной дисциплине. Программа вступительных испытаний в аспирантуру подготовлена в соответствии с федеральными государственными образовательными стандартами высшего образования (уровень магистра или специалиста).

Экзамен проводится с целью выявления у поступающего объёма научных знаний, научно-исследовательских компетенций, навыков системного и критического мышления, необходимых для обучения в аспирантуре. Поступающий должен показать профессиональное владение теорией и практикой в предметной области, продемонстрировать умение вести научную дискуссию.

1.2. Программой устанавливается:

форма, структура, процедура сдачи вступительного испытания;

шкала оценивания;

максимальное и минимальное количество баллов для успешного прохождения вступительного испытания;

критерии оценки ответов.

1.3. Вступительное испытание проводится на русском языке.

1.4. Организация и проведение вступительного испытания осуществляется в соответствии с Правилами приема, утвержденными приказом НИЦ «Курчатовский институт».

1.5. По результатам вступительного испытания, поступающий имеет право подать на апелляцию о нарушении, по мнению поступающего, установленного порядка проведения вступительного испытания и (или) о несогласии с полученной оценкой результатов вступительного испытания в порядке, установленном Правилами приема, действующими на текущий год поступления.

2. Форма, процедура проведения и шкала оценивания вступительного испытания

2.1. Вступительное испытание проводится в форме экзамена на основе билетов. Экзамен проходит в устной форме. Подготовка к ответу составляет 1 астрономический час (60 минут) без перерыва с момента раздачи билетов. Ответ на билет оценивается от 0 до 10 баллов в зависимости от полноты и правильности ответов.

Билет включает в себя два вопроса по дисциплинам специализации в соответствии с перечнем тем, установленных данной Программой, на которые необходимо дать развернутые и полные ответы.

Вопросы по дисциплинам специализации включают в себя вопросы по научным специальностям:

1.4.1. Неорганическая химия;

1.4.4. Физическая химия.

В случае проведения экзамена в дистанционном формате вступительное

испытание проводится в режиме видеоконференцсвязи.

2.2. Экзамен по специальной дисциплине оценивается по 10-балльной шкале. Минимальное количество баллов, подтверждающее успешное прохождение вступительного испытания по специальной дисциплине, устанавливается равным 4 баллам.

Шкала оценивания

Оценка, баллы	Уровень подготовленности, характеризующий оценкой
9-10	Поступающий уверенно владеет материалом, приводит точные формулировки теорем, процессов и явлений, и других утверждений, сопровождает их строгими и полными доказательствами, уверенно отвечает на дополнительные вопросы программы вступительного испытания.
6-8	Поступающий владеет материалом, приводит точные формулировки теорем, процессов и явлений, и других утверждений, сопровождает их доказательствами, в которых допускает отдельные неточности. Отвечает на большинство дополнительных вопросов по программе вступительного испытания.
4-5	Поступающий знаком с основным материалом программы, приводит формулировки теорем, процессов и явлений, и других утверждений, но допускает некоторые неточности, сопровождает их доказательствами, в которых допускает погрешности либо описывает основную схему доказательств без указания деталей. Отвечает на дополнительные вопросы по программе вступительного испытания, допуская отдельные неточности.
0-3	Поступающий не владеет основным материалом программы, не знаком с основными понятиями, не способен приводить формулировки теорем, процессов и явлений, и других утверждений, не умеет доказывать теоремы и другие утверждения, не знает даже схемы доказательств. Не отвечает на большинство дополнительных вопросов по программе вступительного испытания.

3. Вопросы к вступительному испытанию

1.4.1. Неорганическая химия

Основы атомно-молекулярного учения

1. Основные понятия химии: атом, молекула, химический элемент, изотопы, простое и сложное вещество, эквивалент, моль. Основные стехиометрические законы, их развитие.

Квантовомеханическая модель атома

2. Развитие представлений о строении атома: ядро, протоны, нейтроны, электроны. Волновая теория строения атома, двойственная природа электрона, принцип неопределённости.

Периодический закон Д.И. Менделеева и периодическая система элементов

3. Периодический закон Д.И. Менделеева, развитие учения о периодичности. Длинная и короткая формы периодической системы, периоды, группы и подгруппы, семейства элементов.

Теории химической связи и валентности

4. Механизм образования химической связи, её характеристики, типы связей. Свойства ковалентной связи: насыщенность связи, понятие валентности, развитие этого понятия; направленность ковалентной связи.

5. 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.

Химия комплексных соединений

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 полидентатных лигандов.

7. Классы комплексных соединений: одноядерные с моно- и полидентатными лигандами; многоядерные комплексы; π-комплексы; карбонилы. Изомерия комплексных соединений и комплексного иона.

8. Теория кристаллического поля, применение ее для объяснения магнитных свойств и цветности комплексов. Комплексообразование в растворах. Устойчивость комплексных ионов.

Закономерности протекания химических процессов

9. Химическое равновесие. Константа равновесия, закон действующих масс для равновесия. Смещение химического равновесия, принцип Ле-Шателье. Факторы, влияющие на равновесие: концентрация, температура, давление.

10. Скорость химических реакций. Влияние различных факторов на скорость реакции: концентрации веществ, давления (для реакций, протекающих в газовой фазе), температуры, катализатора.

Растворы электролитов и неэлектролитов

11. Свойства растворов электролитов. Теория электролитической диссоциации. Сильные и слабые электролиты. Степени электролитической диссоциации, константа диссоциации, их связь.

Химия элементов – неметаллов и металлов

12. Водород, положение в периодической таблице. Его физические и химические свойства. Получение водорода в лаборатории и в технике. Его применение. Классы водородных соединений, свойства соединений.

13. 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.

14. 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.

15. 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.

16. 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.

17. Общая характеристика соединений двух- и трехвалентных элементов семейства железа: оксиды, гидроксиды, соли, комплексные соединения железа, кобальта, никеля. Биологическая роль железа и кобальта.

18. Общая характеристика f-элементов, положение их в периодической системе, электронное строение атомов. Лантаноиды, нахождение в природе, извлечение, получение индивидуальных редкоземельных элементов (РЗЭ).

19. 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.

Материаловедение (химическая технология)

20. Процесс кристаллизации. Фазы и структуры в металлические сплавах.

Список рекомендуемой литературы

1. Третьяков Ю.Д., Мартыненко Л.И., Григорьев А.Н., Цивадзе А.Ю. Неорганическая химия. Химия элементов: учебник для студентов вузов, обучающихся по направлению 510500 «Химия» и специальности 011000 «Химия»: [в 2 т.]. - М.: Изд-во Моск. ун-та, 2007.

2. Гринвуд Н., Эрншо А. Химия элементов: в 2-х т. – М., 2011.

3. Ахметов Н.С. Общая и неорганическая химия. - М., 2003.

4. Карапетьянц М.Х., Дракин С.И. Общая и неорганическая химия. - М., 1994.

5. Угай Я.А. Общая и неорганическая химия. - М., 2007.

6. Лидин Р.А., Молочко В.А., Андреева Л.Л. Химические свойства неорганических веществ. - М.: КолосС, 2003.

7. Общая и неорганическая химия: учебник для вузов: в 2 т./ Воробьев А.Ф., Кузнецов Н.Т., Цивадзе А.Ю., Симанова С.А., Василев В.А. - М.: Академкнига, 2007.

Дополнительная литература

1. Неорганическая химия: в 3-х т. / Под ред. Ю.Д. Третьякова. Т. 1. Физико-химические основы неорганической химии / М.Е. Тамм, Ю.Д. Третьяков.- М., 2004.

2. Неорганическая химия: в 3-х т. / Под ред. Ю.Д. Третьякова. Т. 2. Химия непереходных элементов / А.А. Дроздов, В.П. Зломанов, Г.Н. Мазо, Ф.М. Спиридонов.- М., 2004.

3. Неорганическая химия: в 3-х т. / Под ред. Ю.Д. Третьякова. Т. 3. Химия переходных элементов: Кн. 1, 2 / А.А. Дроздов, В.П. Зломанов, Г.Н. Мазо, Ф.М. Спиридонов.- М., 2007.

4. Шрайвер Д., Эткинс П. Неорганическая химия. В 2-х т. – М., 2004.

5. Некрасов Б.В. Основы общей химии.- В 2-х т.- М., 1973.

6. Реми Г. Курс неорганической химии.- В 2-х т.- М., 1966.

7. Коттон Ф., Уилкинсон Дж. Современная неорганическая химия.- В 3-х т.- М., 1969.

8. Турова Н.Я. Неорганическая химия в таблицах.- М., 1996.

9. Рипан Р., Четяну И. Неорганическая химия.- В 2-х т.- М., 1972.

10. Химическая энциклопедия / Под ред. Н.С. Зефирова.- В 5-и т.- М., 1989 - 1997.

1.4.4. Физическая химия

Основы квантовой химии и строения молекул

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

2. Электронное строение атомов и молекул. Одноэлектронное приближение. Метод Хартри-Фока. Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Правило Хунда. Электронная плотность. Распределение электронной плотности в двухатомных молекулах. Пределы применимости одноэлектронного приближения.

Основы химической термодинамики

3. Первый закон термодинамики. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия, теплоемкость. Закон Гесса и его следствия. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Теплота сгорания. Теплоты образования. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула

Кирхгоффа. Зависимость теплоемкости от температуры и расчеты тепловых эффектов реакций.

4. Второй закон термодинамики. Энтропия. Уравнение второго начала термодинамики для обратимых и необратимых процессов. Некомпенсированная теплота Клаузиуса и работа, потерянная в необратимом процессе. Теорема Карно — Клаузиуса. Различные шкалы температур. Энтропия как функция состояния. Изменение энтропии при различных процессах. Изменение энтропии изолированных процессов и направление процесса.

5. Третий закон термодинамики. Теорема Нернста и постулат Планка. Вычисление абсолютной энтропии твердых, жидких и газообразных веществ. Стандартные энтропии.

6. Уравнение Гиббса — Гельмгольца и его роль в химии. Работа и теплота химического процесса. Химические потенциалы. Химический потенциал идеального и неидеального газов.

Растворы. Фазовые равновесия

7. Растворы различных классов. Идеальные растворы в различных агрегатных состояниях и общее условие идеальности растворов. Давление насыщенного пара жидких растворов. Закон Рауля и его термодинамический вывод. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение по парциальным давлениям компонент. Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонент.

8. Гетерогенные системы. Понятие фазы, компонента, степени свободы. Правило фаз Гиббса и его вывод. Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды, серы, фосфора и углерода. Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона — Клаузиуса и его применение к различным фазовым переходам первого рода. Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста.

9. Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем и их анализ на основе правила фаз. Равновесие жидкость — пар в двухкомпонентных системах. Равновесные составы пара и жидкости. Законы

Гиббса — Коновалова. Разделение веществ путем перегонки. Азеотропные смеси и их свойства.

Химические и адсорбционные равновесия

10. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Химическое равновесие в идеальных и неидеальных системах. Термодинамический вывод закона действующих масс. Зависимость констант равновесия от температуры. Приведенная энергия Гиббса и ее использование для расчетов химических равновесий. Уравнения изобары и изохоры реакции их термодинамический вывод.

11. Явления адсорбции. Адсорбент. Адсорбат. Структура поверхности и пористость адсорбента. Вид адсорбции. Локализованная и делокализованная адсорбция. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Ленгмюра, его термодинамический вывод и условия применимости. Адсорбция из растворов. Гиббсовская адсорбция.

Элементы статистической термодинамики

12. Механическое описание молекулярной системы. Распределения Максвелла — Больцмана, использование для вычисления средних скоростей и энергий молекул в идеальных газах. Статистические средние значения макроскопических величин. Ансамбли Гиббса. Метод функций распределения для канонического и макроканонического ансамблей. Основные постулаты статистической термодинамики.

13. Каноническая функция распределения Гиббса. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция. Статистические выражения для основных термодинамических функций — внутренней энергии, энтропии, энергии Гельмгольца и энергии Гиббса. Статистические расчеты энтропии. Формула Больцмана. Постулат Планка и абсолютная энтропия.

Химическая кинетика

14. Кинетический закон действия масс и область его применимости. Составление кинетических уравнений для известного механизма реакции. Прямая и

обратная задачи химической кинетики. Зависимость константы скорости от температуры. Уравнение Аррениуса. «Эффективная» и «истинная» энергии активации.

15. Сложные реакции. Принцип независимости элементарных стадий. Методы составления кинетических уравнений. Обратимые реакции первого порядка. Параллельные реакции. Последовательные реакции на примере двух необратимых реакций первого порядка. Принцип квазистационарности Боденштейна и область его применимости. Применение принципа стационарности для вычисления начальной скорости гомогенной каталитической реакции с участием одного реагента. Уравнение Михаэлиса — Ментэн.

16. Цепные реакции. Элементарные процессы возникновения, продолжения, разветвления и обрыва цепей. Длина цепи. Различные методы расчета скорости неразветвленных цепных реакций. Применение метода стационарности для составления кинетических уравнений неразветвленных цепных реакций на примере темнового образования НВг.

17. Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации. Метод переходного состояния (активированного комплекса). Свойства активированного комплекса. Статистический расчет константы скорости. Основные допущения теории активированного комплекса и область его применимости. Термодинамический аспект теории активированного комплекса.

Основы молекулярной фотоники

18. Электронная структура молекул. Возбужденные состояния. Потенциальные поверхности электронновозбуждённых состояний. Принцип Франка-Кондона. Диаграмма Яблонского. Основные фотофизические процессы. Поглощение и испускание света. Матричные элементы переходов. Релаксация. Спектры поглощения и люминесценции. Флуоресценция и фосфоресценция. Квантовые выходы и времена жизни люминесценции.

19. Тушение люминесценции. Взаимодействия в возбужденных состояниях, комплексы с переносом заряда, эксимеры и эксиплексы. Перенос электрона. Перенос

энергии электронного возбуждения. Индуктивно-резонансный механизм. Теория Ферстера-Декстера. Миграция возбуждения.

20. Законы фотохимии. Классификация фотохимических реакций. Фотодиссоциация. Фотоприсоединение. Фотозамещение и фотоперегруппировка. Фотохимические окислительно-восстановительные реакции. Фотохимическая кинетика.

Список рекомендуемой литературы

1. В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. Теория строения молекул. – Ростов-на-Дону: Феникс, 1997.
2. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. – М.: Изд-во МГУ, 2001.
3. А.Г. Стромберг, Д.П. Семченко. Физическая химия. – М.: Высш. Шк., 1999.
4. О.М. Полтораки. Термодинамика в физической химии. – М.: Высш. Шк., 1991.
5. Я.И. Герасимов и др. Курс физической химии. Т.1-2. – М.: Химия, 1969.
6. Е.Н. Еремин, Основы химической кинетики. Учеб. Пособие. – М.: Высш. Шк., 1976.
7. А.П. Пурмаль. А,Б,В... химической кинетики. – М.: Академкнига, 2004.
8. Дж. Балтроп, Дж. Койл. Возбужденные состояния в органической химии. – М.: Мир, 1978 .
9. Экспериментальные методы химии высоких энергий. Под ред. М.Я. Мельникова – М: Изд-во МГУ, 2009
10. И. Чоркендорф, Х. Наймантсведрайт. Современный катализ и химическая кинетика. – Долгопрудный: Интеллект, 2010.
11. Г.М. Панченков, В.П. Лебедев. Химическая кинетика и катализ. Учебное пособие для вузов. — 3-е изд. испр. и доп. – М.: Химия, 1985.

Дополнительная литература

1. Химическая энциклопедия / Под ред. Н.С. Зефирова.- В 5-и т. – М.: 1989 - 1997.
2. Н.М. Эммануэль, Д.Г. Кнорре. Курс химической кинетики. – М.: Высш. Шк., 1974.
3. И.А. Семиохин, Б.В. Страхов, А.И. Осипов. Кинетика химических реакций. – М.: Изд-во МГУ, 1995.
4. Г. Эйринг, С.Г. Лин, С.М. Лин. Основы химической кинетики. – М.: Мир, 1983.
5. С. Г. Энтелис, Р. П. Тигер «Кинетика реакций в жидкой фазе», – М.: Химия, 1973.
6. Д.А. Франк-Каменецкий. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. – М.: Наука, 1987.
7. Е.А. Мельвин-Хьюз. Равновесие и кинетика реакций в растворах. – М.: Химия, 1975.
8. О.В. Крылов, Б.Р. Шуб. Неравновесные процессы в катализе. – М.: Химия, 1990.
9. Н.Н. Семенов. Цепные реакции. – М.: Наука, 1986.
10. Н. Турро. Молекулярная фотохимия. – М.: Мир. 1967.
11. Дж. Калверт, Дж. Питтс. Фотохимия. – М.: Мир, 1968
12. Г.О. Беккер. Введение в фотохимию органических соединений. – М.: Химия. 1976.
13. Л.А. Грибов. Введение в молекулярную спектроскопию. – М.: Физматгиз., 1976.
14. Л.А. Грибов, С.П. Муштакова. Практическая квантовая химия. – М.: Гардарика, 1998.
15. Л.В. Левшин, А.М. Салецкий. Молекулярная спектроскопия. – М.: МГУ. 1994.
16. И.Г. Каплан. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. – М.: Наука, 1982.

17. В.И. Пупышев, Н.Ф. Степанов. Квантовая механика молекул и квантовая химия М., Из-во МГУ, 1991, 379 с.

18. Б.Б. Дамаскин, О.А. Петрий. Электрохимия. Учеб. Пособие. – М.: Высш. Шк., 1987.