

*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Российский университет дружбы народов»*

Факультет физико-математических и естественных наук

**ПРОГРАММА
ГОСУДАРСТВЕННОЙ ИТОГОВОЙ АТТЕСТАЦИИ**

Направление подготовки: 04.06.01 «Химические науки»

Направленность программы (профиль)

- **Physical chemistry of adsorption and catalysis / Физическая химия адсорбции и катализа**

Квалификация выпускника

Исследователь. Преподаватель – исследователь

2021 г.

1. Общие положения

1.1. Ответственность и порядок действий по подготовке и проведению государственных итоговых испытаний в РУДН, а также перечень, очередность, сроки прохождения документов, необходимых для осуществления государственной итоговой аттестации, между структурными подразделениями определяет Порядок проведения итоговой государственной аттестации обучающихся.

1.2. Государственная итоговая аттестация по программе подготовки по направлению 04.06.01 «Химические науки» включает государственный экзамен по химии (неорганической/органической/физической в соответствии с профилем программы) и защиту научной квалификационной работы в виде научного доклада.

1.3. Результаты любого из видов аттестационных испытаний, включенных в государственную итоговую аттестацию, определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

2. Цели и задачи государственной итоговой аттестации

2.1. **Целью** государственной итоговой аттестации является определение соответствия результатов освоения обучающимися основных образовательных программ по направлению 04.06.01 «Химические науки» (квалификация Исследователь. Преподаватель – исследователь) требованиям ОС ВО РУДН.

Государственная итоговая аттестация включает государственный экзамен, установленный Ученым советом университета, и защиту научной квалификационной работы (диссертации, НКР).

2.2. **Задачами** государственной итоговой аттестации являются:

- проверка качества обучения личности основным естественнонаучным законам и явлениям, необходимым в профессиональной деятельности;
- определение уровня теоретической и практической подготовленности выпускника к выполнению профессиональных задач в соответствии с получаемой квалификацией;
- установление степени стремления личности к саморазвитию, повышению своей квалификации и мастерства;
- проверка сформированности устойчивой мотивации к профессиональной деятельности в соответствии с предусмотренными ОС ВО РУДН видами профессиональной деятельности;
- проверка способности находить организационно-управленческие решения в нестандартных ситуациях и готовность нести за них ответственность;
- обеспечение интеграции образования и научно-технической деятельности, повышение эффективности использования научно-технических достижений, реформирование научной сферы и стимулирование инновационной деятельности;
- обеспечение качества подготовки в соответствии с требованиями ОС ВО РУДН.

3. Программа государственного экзамена

3.1. Государственный экзамен по направлению 04.06.01 «Химические науки» проводится в устной форме с использованием экзаменационных билетов.

3.2. В рамках государственного экзамена проверяется степень освоения выпускников следующих компетенций: УК-1; УК-5; ОПК-3; ПК-1; ПК-3; ПК-4

Универсальных компетенций:

- способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);

– способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития (УК-5)

Общепрофессиональных компетенций:

– готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования (ОПК-3).

Профессиональных компетенций:

– Владение методологией теоретических и экспериментальных исследований в области химии, владение культурой научного исследования в области химии (ПК-1);

– Наличие опыта профессионального участия в научных дискуссиях, умением представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций в рецензируемых российских и международных изданиях (ПК-3);

– Способность применять фундаментальные научные знания в области химии и смежных наук при осуществлении преподавательской деятельности; владение методами преподавания и разработки учебно-методических материалов дисциплин в области химии (ПК-4).

3.3. Объем государственного экзамена

Общее количество экзаменационных билетов определяется числом выпускников, допущенных к прохождению государственного экзамена. Количество вопросов в экзаменационном билете: 2-4.

1-2 вопроса сформулированы на основе программы кандидатского минимума по специальности.

1-2 вопроса сформулированы на основе программ специальных дисциплин и направлены на подтверждение квалификации «Преподаватель-исследователь».

По решению экзаменационной комиссии выпускнику могут быть заданы дополнительные вопросы, относящиеся к основным разделам программы государственного экзамена и включенные в список вопросов для подготовки к государственному экзамену.

3.4. Содержание государственного экзамена:

Профиль «Physical chemistry of adsorption and catalysis / Физическая химия адсорбции и катализа» (специальность 1.4.4. Физическая химия)

1. Строение вещества

1.1. Основы классической теории химического строения. Конформации молекул. Связь строения и свойств молекул.

1.2. Физические основы учения о строении молекул.

Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Потенциальные кривые и поверхности потенциальной энергии. Электронное строение атомов и молекул.

1.3. Симметрия молекулярных систем.

1.4. Электрические и магнитные свойства. Оптические спектры молекул. Определение структурных характеристик молекул из спектроскопических данных.

1.5. Межмолекулярные взаимодействия.

1.6. Строение конденсированных фаз.

Идеальные кристаллы. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Симметрия кристаллов. Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов. Жидкости. Мгновенная и колебательно усреднённая структура жидкости.

2. Химическая термодинамика

2.1. Основные понятия и законы термодинамики.

Основные понятия термодинамики. Первый закон термодинамики и его применение. Тепловой эффект химической реакции. Закон Гесса. Второй закон термодинамики. Энтропия и её изменения в обратимых и необратимых процессах. Характеристические

функции. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов. Химическое равновесие.

2.2. Элементы статистической термодинамики.

Микро- и макросостояния химических систем. Метод Больцмана. Распределение Максвелла – Больцмана. Метод Гиббса. Микроканоническое и каноническое распределения. Статистические выражения для основных термодинамических функций замкнутых систем. Статистическая теория теплоемкости Эйнштейна идеального кристалла, теория Дебая.

2.3. Элементы термодинамики необратимых процессов

Основные положения термодинамики неравновесных процессов. Локальное равновесие. Флуктуации. Функция диссипации.

2.4. Растворы. Фазовые равновесия.

Различные типы растворов. Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонент растворов. Коллигативные свойства растворов. Гетерогенные системы. Фазовые переходы первого и второго рода. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.

2.5. Адсорбция и поверхностные явления.

Адсорбция. Уравнение изотермы адсорбции Гиббса. Изотермы и изобары адсорбции. Константа адсорбционного равновесия. Модельные уравнения адсорбции. Хроматография, различные её типы. *Поверхность раздела фаз*. Свободная поверхностная энергия, поверхностное натяжение, избыточные термодинамические функции поверхностного слоя. Капиллярные явления.

2.6. Электрохимические процессы.

Основные положения теории Дебая – Хюккеля. Электропроводность растворов электролитов. Электродвижущая сила.

3. **Кинетика химических реакций и катализ**

3.1 Формальная кинетика простых и сложных реакций. Феноменологическая кинетика сложных химических реакций.

3.2 Цепные реакции. Реакции в потоке.

3.3 Макрокинетика. Роль диффузии в кинетике гетерогенных реакций.

3.3 Зависимость скорости реакции от температуры.

3.4 Теория активных столкновений. Теория переходного состояния (активированного комплекса). Схема Линдемана – Христиансена. Теория РРКМ.

3.5 Фотохимические и радиационнохимические реакции. Электрохимические реакции.

3.6 Классификация каталитических реакций и катализаторов. Гомогенный катализ. Ферментативный катализ. Гетерогенный катализ.

4. Методические рекомендации к подготовке и сдаче итогового государственного экзамена

4.1. Рекомендуемая литература

Профиль «Physical chemistry of adsorption and catalysis / Физическая химия адсорбции и катализа» (специальность 1.4.4. Физическая химия)

Основная литература

1. Полторак О.М. Термодинамика в физической химии, М.: Высшая школа, 1991.

2. Курс физической химии, под ред. А.И. Герасимова, Т.1, 2, 1974.

3. Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. М.: Мир, 2002

4. Ягодский В.Д. Статистическая термодинамика в физической химии, М.: Бинوم. Лаборатория знаний, 2009.

5. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Ростов-Дон: Феникс, 1997.

6. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, Изд-во МГУ, 2001.

7. Романовский Б.В. Основы химической кинетики, из-во «Экзамен», 2006.
8. Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики. М.: Высшая школа, 1984.

Дополнительная литература

1. Эткинс П., де Паула Дж. Физическая химия. Равновесная термодинамика. Ч.1, М.: Мир, 2007.
2. Карапетьянц М.Х. Химическая термодинамика. Изд.4, URSS, 2013.
3. Пармон В.Н. Термодинамика неравновесных процессов для химиков. Долгопрудный: ИД "Интеллект", 2015.
4. Ягодский В.Д. Адсорбция, М.: Бинوم. Лаборатория знаний, 2014.
5. Крылов О.В. Гетерогенный катализ. Издательство: ИКЦ "Академкнига", 2004.
6. Дамаскин Б.Б., Петрий О.А., Цирлина Г.А. Электрохимия. М.: Химия, 2001.

4.2. Дополнительные рекомендации

При подготовке к государственному экзамену аспиранту рекомендовано использовать ресурсы Электронно-библиотечной системы РУДН (ЭБС РУДН) <http://lib.rudn.ru/MegaPro/Web>

Использование электронных источников информации, средств связи и сети Интернет во время проведения государственного экзамена не допускается.

5. Оценочные средства, предназначенные для установления в ходе государственного экзамена соответствия/несоответствия уровня подготовки выпускников, завершивших освоение ОП ВО по направлению 04.06.01 «Химические науки», требованиям соответствующего ОС ВО РУДН.

Перечень компетенций, которыми должны овладеть обучающиеся в результате освоения образовательной программы:

Универсальных компетенций (УК):

- Способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);
- Способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития (УК-5)

Общепрофессиональные компетенции (ОПК)

- Готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования (ОПК-3).

Профессиональные компетенции (ПК)

- Владение методологией теоретических и экспериментальных исследований в области химии, владение культурой научного исследования в области химии (ПК-1);
- Наличие опыта профессионального участия в научных дискуссиях, умением представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций в рецензируемых российских и международных изданиях (ПК-3);
- Способность применять фундаментальные научные знания в области химии и смежных наук при осуществлении преподавательской деятельности; владение методами преподавания и разработки учебно-методических материалов дисциплин в области химии (ПК-4).

Критерии оценок государственного экзамена:

Оценка «5» (**отлично**) ставится, если:

- содержание материала экзаменационного билета раскрыто полностью;
- материал изложен грамотно, в определенной логической последовательности;

- продемонстрировано системное и глубокое знание программного материала;
- точно используется терминология;
- показано умение иллюстрировать теоретические положения конкретными примерами, применять их в новой ситуации;
- продемонстрировано усвоение ранее изученных сопутствующих вопросов, сформированность и устойчивость компетенций, умений и навыков;
- ответ прозвучал самостоятельно, без наводящих вопросов;
- продемонстрирована способность творчески применять знание теории к решению профессиональных задач;
- продемонстрировано знание современной учебной и научной литературы;
- аспирант демонстрирует как знание, так и понимание вопроса, а также проявляет способность применить педагогические, исследовательские и информационные компетенции на практике по профилю своего обучения;

Оценка «4» (**хорошо**) ставится, если:

- вопросы экзаменационного материала излагаются систематизированно и последовательно;
- продемонстрировано умение анализировать материал, однако не все выводы носят аргументированный и доказательный характер;
- в изложении допущены небольшие пробелы, не искажившие содержание ответа;
- допущены один – два недочета при освещении основного содержания ответа, исправленные по замечанию экзаменатора;
- допущены ошибка или более двух недочетов при освещении второстепенных вопросов, которые легко исправляются по замечанию экзаменатора;
- аспирант демонстрирует как знание, так и понимание вопроса, но испытывает незначительные проблемы при проявлении способности применить педагогические, исследовательские и информационные компетенции на практике по профилю своего обучения.

Оценка «3» (**удовлетворительно**) ставится, если:

- содержание материала раскрыто непоследовательно или частично, но показано общее понимание вопроса;
- имелись затруднения или допущены ошибки в определении понятий, использовании терминологии, исправленные после нескольких наводящих вопросов;
- имеются фактические пробелы и не полное владение литературой;
- слабая практическая применимость педагогических, исследовательских и информационных компетенций по профилю своего обучения.

Оценка «2» (**неудовлетворительно**) ставится, если:

- не раскрыто основное содержание вопроса;
- обнаружено незнание или непонимание большей или наиболее важной части материала;
- допущены ошибки в определении понятий, при использовании терминологии, которые не исправлены после нескольких наводящих вопросов;
- не сформированы компетенции, умения и навыки, отсутствие практического применения педагогических, исследовательских и информационных компетенций на практике по профилю своего обучения.

6. Требования к научной квалификационной работе

6.1. К защите научной квалификационной работы допускается лицо, успешно завершившее в полном объеме освоение основной образовательной программы аспирантуры по направлению 04.06.01 «Химические науки» и успешно сдавшие государственный экзамен. Защита НКР проводится на открытом заседании государственной экзаменационной комиссии (ГЭК).

Государственная итоговая аттестация проводится в виде устного представления НКР, с последующими устными ответами на вопросы членов ГЭК в соответствии с Положением университета о НКР. Доклад и/или ответы на вопросы членов ГЭК могут быть на иностранном языке.

6.2. В рамках проведения защиты научной квалификационной работы проверяется степень освоения выпускников следующих компетенций:

Универсальных компетенций (УК):

- Способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);
- Способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки (УК-2);
- Готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач (УК-3);
- Готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках, в том числе готовностью к коммуникации в устной и письменной формах на русском и иностранном языках для решения задач профессиональной деятельности, владение иноязычной коммуникативной компетенцией в официально-деловой, учебно-профессиональной, научной, социокультурной, повседневной бытовой сферах иноязычного общения (УК-4);
- Способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития (УК-5)

Общепрофессиональные компетенции (ОПК)

- Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);
- Готовность организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук (ОПК-2)

Профессиональные компетенции (ПК)

- Владение методологией теоретических и экспериментальных исследований в области химии, владение культурой научного исследования в области химии (ПК-1);
- Способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по выбранному профилю (научной специальности) (ПК-2);
- Наличие опыта профессионального участия в научных дискуссиях, умением представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций в рецензируемых российских и международных изданиях (ПК-3);

6.3. Перечень примерных тем научной квалификационной работы.

- Области протекания гетерогенно-каталитических реакций, их признаки и методы экспериментального подтверждения.
- Получение водорода и синтез-газа каталитической конверсией углеводородов. Синтез Фишера-Тропша. Гидрирование и дегидрирование органических соединений.
- Методы экспериментального определения изотерм адсорбции.
- Полуэмпирические методы квантовой химии: приближение NDO, методы CNDO, INDO, MINDO/3, MNDO, AM1, PM3, метод молекулярной механики.
- Фазовые переходы в сегнетоэлектрических кристаллах.

- Новые направления синтеза неорганических твердых веществ с заданными свойствами.
- Влияние структуры твердых тел на их физические и химические свойства.

6.4. Задачи, которые обучающийся должен решить в процессе выполнения научной квалификационной работы:

- углубление, закрепление и систематизация теоретических и практических знаний и применение этих знаний при решении практических задач, связанных с будущей работой выпускников в государственных и негосударственных структурах, организациях;
- развитие навыков разработки программ проведения научных исследований и технических разработок по химии, подготовки заданий для проведения исследовательских и научных работ;
- овладение навыками сбора, обработки и анализа информации для написания и защиты научной работы;
- совершенствование навыков работы со специальной литературой, источниками, опубликованными в периодической печати.
- умение разрабатывать методики и организовывать проведение экспериментов и испытаний, анализ их результатов;
- развитие навыков проведения самостоятельного анализа, формулирования выводов при рассмотрении задач профессиональной деятельности и других проблем междисциплинарного характера;
- умение самостоятельно осуществлять подготовку научно-технических отчетов, обзоров, публикаций по результатам выполненных исследований.

6.5. Этапы выполнения научной квалификационной работы (ВКР), условия допуска обучающегося к процедуре защиты, требования к структуре, объему, содержанию и оформлению, а также перечень обязательных и рекомендуемых документов, представляемых к защите указаны в методических указаниях, утвержденных в установленном порядке:

- Положения о проведении государственной итоговой аттестации по образовательным программам высшего образования – программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре (Приказ Ректора №41 от 20.01.2017)
- Правила подготовки и оформления научной квалификационной работы выпускника РУДН (приказ Ректора № 878 от 30 ноября 2016г.)
- Регламент проверки письменных работ обучающихся в системе "Антиплагиат.РУДН" (приказ Ректора № 228 от 30 марта 2018 г.)
- Регламент размещения выпускных квалификационных работ в модуле ВКР РУДН с доступом через сеть Интернет (приказ Ректора № 272 от 23 апреля 2014г.)

6.6. Оценочные средства.

Защита научной квалификационной работы проводится на открытом заседании аттестационной комиссии с участием не менее двух третей ее состава.

Результаты защиты научной квалификационной работы определяются оценками "отлично", "хорошо", "удовлетворительно", "неудовлетворительно" и объявляются в тот же день после оформления в установленном порядке протоколов заседаний экзаменационных комиссий.

Выпускная квалификационная работа представляет собой защиту результатов научно-исследовательской работы, выполненной обучающимся, в виде научного доклада, демонстрирующую степень готовности выпускника к ведению профессиональной научно-педагогической деятельности.

Научно-квалификационная работа должна быть написана аспирантом самостоятельно, обладать внутренним единством и содержать положения, выдвигаемые для публичной защиты, должна свидетельствовать о личном вкладе аспиранта в решение задачи, имеющей существенное значение для науки в соответствии с направленностью обучения. Предложенные автором научной научно-квалификационной работы решения должны быть аргументированы и оценены по сравнению с другими известными решениями.

Требования к научной квалификационной работе определяются ГОСТ Р 7.0.11-2011, ОС ВО РУДН для программ аспирантуры по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки» и критериями, установленным Министерством образования и науки Российской Федерации для научно-квалификационной работы (диссертации) на соискание ученой степени кандидата наук.

Представление и обсуждение научного доклада (защиты НКР) в качестве государственного аттестационного испытания носит характер научной дискуссии и проводится в соответствии со следующим регламентом:

выступление аспиранта с научным докладом (до 20 минут);

ответы аспиранта на вопросы по докладу;

свободная дискуссия;

заключительное слово аспиранта;

вынесение и объявление решения государственной экзаменационной комиссии о результатах государственного аттестационного испытания в форме защиты научной квалификационной работы.

Выпускная квалификационная работа оценивается, исходя из следующих критериев:

Критерии оценки		Максимальный балл
1	Актуальность исследования.	10
2	Уровень методологической проработки проблемы (теоретическая часть работы).	10
3	Аргументированность и степень обоснованности выводов, рекомендаций, положений, выносимых на защиту.	10
4	Степень разработанности проблемы исследования, представленная во введении работы и автореферате.	10
5	Новизна исследования. Практическая значимость результатов исследования.	10
6	Методический аппарат исследования и степень достоверности результатов прикладного исследования.	10
7	Уровень владения методами исследования в области научной специальности.	10
8	Сформулированные рекомендации по направлениям, технологиям дальнейших научных исследований в рамках проблематики научной работы.	10
9	Оригинальность выводов, заключений и предложений, представленных в тексте, автореферате и публикациях аспиранта	10
10	Научная эрудиция аспиранта при ответе на вопросы.	10
Максимально возможная сумма баллов:		100

Если по результатам защиты НКР ни один из перечисленных выше критериев не был оценен неудовлетворительно большинством членов Государственной экзаменационной комиссии и сумма баллов превышает 50, ГЭК дает положительную оценку защите НКР, а

факультет физико-математических и естественных наук РУДН оформляет заключение о рекомендации научно-квалификационной работы (диссертации) к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук.

При успешном представлении научного доклада по результатам научно-квалификационной работы (защиты ВКР) и положительных результатах государственного экзамена, решением Государственной аттестационной комиссии обучающемуся присуждается квалификация «Исследователь. Преподаватель-исследователь», и выдается диплом (с приложением) об окончании аспирантуры государственного образца.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ВО РУДН.

Разработчики:

Доцент кафедры физической и коллоидной химии



Т.Ф. Шешко

Руководитель программы



Ю.М. Серов