

**Приложение 1**  
**УТВЕРЖДЕНО**  
**Приказом ФИЦ КазНЦ РАН**  
**от 21.02.2020 № 4-А**

Рекомендовано к утверждению Ученым советом КФТИ им. Е.К. Завойского – обособленного структурного подразделения ФИЦ КазНЦ РАН 19.02.2020, протокол №5

## **ПРОГРАММА КАНДИДАТСКОГО ЭКЗАМЕНА**

по дисциплине

### **«Химическая физика»**

Уровень высшего образования  
Подготовка кадров высшей квалификации  
Направление подготовки

#### **03.06.01 ФИЗИКА И АСТРОНОМИЯ**

Направленность подготовки:

Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества (01.04.17), физико-математические науки

Квалификация выпускника:

Исследователь. Преподаватель-исследователь

## 1. Введение

Кандидатский экзамен по дисциплине «Химическая физика» является формой промежуточной аттестации аспирантов, обучающихся по направлению 03.06.01 Физика и астрономия, направленность подготовки Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества (01.04.17).

В ходе экзамена оценивается степень овладения аспирантами следующих компетенций

### 1.1 Универсальные компетенции:

- 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);

### 1.2 Общепрофессиональные компетенции:

- способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);
- готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования (ОПК-2).

### 1.3 Профессиональные компетенции:

- Способность проводить самостоятельные исследования в области химической физики, владеть современными методами физического эксперимента, а также способность анализировать экспериментальные данные с целью исследования термодинамики и кинетики химических реакций, фазовых равновесий в одно- и многокомпонентных системах, процессов адсорбции, гомогенного и гетерогенного катализа (ПК-1);
- Способность планировать и организовать физические исследования, применять на практике полученные знания и навыки для написания научных статей, составления и оформления научно-технических документации (ПК-2);
- Способность принимать участие в разработке новых методов и методических подходов в научных исследованиях в области химической физики (ПК-3).

Настоящая программа разработана на основе программы, утвержденной Министерством образования и науки Российской Федерации (Приказ Минобрнауки РФ от 08.10.2007 № 274 «Об утверждении программ кандидатских экзаменов»).

В основу настоящей программы положены следующие дисциплины: атомы и молекулы на поверхности, строение вещества, химическая термодинамика и кинетика.

Кандидатский экзамен по химической физике проводится в устной форме по вопросам программы, на экзамене предлагается три вопроса (без билетов). После устного ответа могут заданы дополнительные и уточняющие вопросы, не выходящие за пределы программы кандидатского экзамена.

## **2. Программа кандидатского экзамена**

### **2.1. Строение вещества**

Основы квантовой теории многоэлектронных систем. Электронное строение молекул. Основные принципы теории валентности. Метод молекулярных орбиталей и его применение к двухатомным молекулам. Молекулярный ион водорода и молекула водорода.

Электронное строение координационных соединений. Межмолекулярное взаимодействие. Теория кристаллического поля. Силы Ван-дер-Ваальса. Донорно-акцепторные комплексы. Водородная связь.

### **2.2. Строение конденсированных фаз**

Структурная классификация конденсированных фаз. Идеальные кристаллы. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах. Доменные структуры. Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов. Металлы и полупроводники. Жидкости. Структура воды и водных растворов. Структура жидких электролитов.

### **2.3. Электронные и ядерные магнитные моменты в магнитном поле**

Дипольный момент и поляризуемость молекул. Магнитные моменты атомов и молекул и магнитная восприимчивость. Магнетон Бора. Строение электронных оболочек переходных и редкоземельных атомов. Правила Хунда. Термы. Магнитные моменты ядер. Прецессия магнитного момента в магнитном поле. Эффект Зеемана. Резонансное поглощение квантов электромагнитного поля.

### **2.4. Электронный парамагнитный резонанс**

Суть явления ЭПР. Классическое рассмотрение магнитного резонанса. Уравнения Блоха. Квантово-механическое рассмотрение явления магнитного резонанса. Спиновый гамильтониан.  $g$ -фактор. Влияние кристаллических полей, тонкая и сверхтонкая структуры. Анизотропия спектров ЭПР парамагнитных центров. Диполь-дипольное взаимодействие. Обменное взаимодействие. Сужение спектра ЭПР. Форма линий ЭПР. Ширина линии. Однородное и неоднородное уширение. Спин-спиновые взаимодействия. Механизмы и времена спиновой релаксации. Электроны проводимости и локализованные магнитные моменты. Парамагнетизм Паули, интенсивность сигнала ЭПР. Скин-эффект и форма линии ЭПР в металлах, теория Дайсона. Спин-орбитальное взаимодействие и сдвиг

сигнала ПР электронов проводимости. Спиновая релаксация в чистых металлах. Релаксация на примесях. Магнитный резонанс в сверхпроводниках. Влияние вихревой решетки на форму сигнала.

### **2.5. Ферромагнитный резонанс**

Суть и особенности ферромагнитного резонанса. Эффекты, связанные с формой образца. Влияние кристаллической магнитной анизотропии на резонансную частоту. Спин-волновой резонанс. Суперпарамагнетизм и магнитный резонанс.

### **2.6. Антиферромагнитный резонанс**

Энергетическая щель антиферромагнетика. Релятивистские и обменные моды. Две ветви АФМР. Поле Дзялошинского и поле анизотропии.

### **2.7. Ядерный магнитный резонанс**

Явление ядерного магнитного резонанса. Протонный магнитный резонанс. Химический сдвиг. Спин-спиновое взаимодействие. Спектры ЯМР органических соединений. Сужение линий, обусловленное движением спинов и обменным взаимодействием. ЯМР в металлах. Сдвиг Найта. Корринговская релаксация. Времена ядерной релаксации. Импульсный ЯМР. Спад свободной индукции. Фурье-спектроскопия. Устройство ЯМР спектрометра.

### **2.8. Химическая термодинамика**

Основные понятия термодинамики. I закон термодинамики для изобарных условий (знтальпия). Закон Гесса (тепловой эффект химической реакции). Следствие закона Гесса. Мольная теплоемкость, зависимость от температуры. Закон Кирхгоффа. II закон термодинамики, энтропия.

### **2.9. Фазовые равновесия в однокомпонентных системах и растворах**

Правило фаз Гиббса (степень свободы, фаза, компонент). Фазовый переход твёрдое тело – жидкость, твёрдое тело – газ, жидкость – газ. Примеры фазовых диаграмм. Диаграмма состояния воды. Растворимость газов, твёрдых веществ. Разбавленные неидеальные растворы. Закон Генри.

### **2.10. Адсорбция**

Физическая и химическая адсорбция. Изотерма адсорбции Лэнгмюра. Адсорбция из смеси газов. Полимолекулярная адсорбция. Адсорбция на жидких поверхностях. Изотерма Гиббса.

### **2.11 Химическая кинетика**

Основные определения и понятия химической кинетики. Основные понятия химической кинетики. Скорость реакции, молекулярность, порядок реакции,

константа скорости. Кинетика односторонних реакций. Обратимые реакции. Последовательные реакции. Лимитирующая стадия.

Теория активных столкновений. Теория переходного состояния.

### **2.12. Кинетика одностадийных и сложных химических реакций**

Методология изучения сложных процессов. Прямая и обратная задачи кинетики. Каталитические реакции. Цепные реакции. Катализ цепных реакций. Автокаталитические реакции. Автоколебательные реакции.

## ***3. Рекомендуемая литература***

1. Герасимов Я. И., Древинг В. П., Еремин Е. Н., Киселев А. В., Лебедев В. П., Панченков Г. М., Шлыгин А. И. Курс физической химии. Т. 1. М. Химия, 1970. 592 с.
2. Карапетьянц М. Х. Химическая термодинамика. М.: Химия, 1975. 520 с.
3. Байрамов В.М. Основы химической кинетики и катализа. М.: Академия. 2003.
4. Даниэльс Ф., Олберти Р. Физическая химия / Пер. с англ. под ред. Топчиевой К. В. М.: Мир, 1978. 645 с.
5. Мелвин – Хьюз Э. А. Физическая химия / Пер с англ. под ред. Герасимова Я. И. в двух книгах. М.: Издательство. 1962. 1148 с
6. Горшков И. Основы физической химии. Бинум: Лаборатория знаний, 2011. - 408 с.
7. Н. М. Эмануэль, Д. Г. Кнорре. Курс химической кинетики. М, Высшая школа, 1974.
8. Буданов, В.В. Химическая кинетика / В.В. Буданов, Т.Н. Ломова, В.В. Рыбкин. - Издательство: "Лань", 2014. - 288 с.  
[http://e.lanbook.com/books/element.php?p11\\_id=42196](http://e.lanbook.com/books/element.php?p11_id=42196)

## 4. Критерии оценки

<b>Отлично</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Все вопросы раскрыты полностью;</li> <li>– Обучающийся владеет основными теориями и глубоко понимает их содержание;</li> <li>– Имеет ясное представление связи теории и практики в рамках излагаемого материала;</li> <li>– Уверенно владеет необходимыми методами решения конкретных задач, может проиллюстрировать основные положения теории конкретными примерами;</li> <li>– Ясно и четко дает основные определения. Владеет терминологическим и понятийным аппаратом;</li> <li>– Развернуто отвечает на дополнительные вопросы.</li> </ul>
<b>Хорошо</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Вопросы раскрыты по существу;</li> <li>– Обучающийся в целом владеет основными теориями и понимает их содержание;</li> <li>– Имеет общее представление о связи теории и практики в рамках излагаемого материала;</li> <li>– Владеет в целом необходимыми методами решения конкретных задач, может проиллюстрировать основные положения теории конкретными примерами;</li> <li>– В достаточной мере владеет понятийным и терминологическим аппаратом;</li> <li>– Имеет затруднения при ответе на дополнительные вопросы.</li> </ul>
<b>Удовлетворительно</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Вопросы раскрыты, но не полностью;</li> <li>– Слабое понимание связи теории и практики;</li> <li>– Обучающийся может проиллюстрировать основные положения теории конкретными примерами, но имеет затруднения при решении некоторых задач;</li> <li>– Обучающийся не демонстрирует уверенного владения понятийным и терминологическим аппаратом;</li> <li>– Дополнительные вопросы вызывают затруднение.</li> </ul>
<b>Неудовлетворительно</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Большая часть вопросов не раскрыта;</li> <li>– Обучающийся не может проиллюстрировать основные положения теории конкретными примерами, не может применить теорию при решении конкретных задач;</li> <li>– Нет ответов на дополнительные вопросы.</li> </ul>