

Федеральное государственное учреждение  
«Федеральный научно-исследовательский центр  
«Кристаллография и фотоника»  
Российской академии наук»

Принято на Ученом совете ЦФ РАН  
Протокол № 2 от 12 апреля 2018 г.



«Утверждаю»  
Директор

О.А. Алексеева

« 12 » апреля 2018 г.

ПРОГРАММА  
Государственной итоговой аттестации

Направление подготовки: 04.06.01 — Химические науки  
02.00.04 «Физическая химия»

Форма обучения:  
Очная

Квалификация  
Исследователь. Преподаватель-исследователь

Москва  
2018

# 1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ГОСУДАРСТВЕННОЙ ИТОГОВОЙ АТТЕСТАЦИИ

Программа ГИА является приложением к основной профессиональной образовательной программе высшего образования по направлению подготовки научно-педагогических кадров высшей квалификации по направлению подготовки: 04.06.01 - Химические науки, профилю подготовки: 02.00.04 «Физическая химия».

**Целью ГИА** является установление уровня подготовки выпускника к выполнению профессиональных задач и соответствия его подготовки требованиям государственного образовательного стандарта по направлению к основной образовательной программе высшего образования подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению 04.06.01 Химические науки профилю 02.00.04 «Физическая химия».

## **Задачами ГИА являются:**

1. Проверка уровня сформированности компетенций, определенных федеральным государственным образовательным стандартом.

### *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 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 (УК-4);

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

### *Общепрофессиональных компетенций:*

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);

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

*Профессиональных компетенций:*

способность творчески использовать полученные знания в области естественно научных дисциплин, применять, анализировать и развивать методы математической и теоретической физики, математического моделирования и теоретического исследования (ПК-1);

владение современными методами физической химии и молекулярного моделирования (ПК-2);

владение современными методами физико-химического исследования органических веществ, средствами планирования и организации исследований, проведения экспериментов, выдвижения гипотез и установления границ их применения (ПК-3);

умение проводить инновационные физико-химические исследования, включая критический анализ данных из мировых информационных ресурсов, сложный эксперимент, формулировку выводов в условиях неоднозначности с применением глубоких профессиональных знаний (ПК-4);

умение применять основные законы физической химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных (ПК-5);

2. Принятие решения о присвоении квалификации по результатам ГИА и выдаче документа о высшем образовании и присвоения квалификации: Исследователь. Преподаватель-исследователь.

## 2. ВИДЫ ГОСУДАРСТВЕННОЙ ИТОГОВОЙ АТТЕСТАЦИИ

Государственная итоговая аттестация выпускников аспирантуры ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН по профилю 02.00.04 «Физическая химия» проводится в форме государственного экзамена и представления научного доклада об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации).

Государственная итоговая аттестация проводится по окончании теоретического периода обучения в конце 4-го года обучения в аспирантуре. Для проведения ГИА приказом по ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН создается государственная аттестационная комиссия (ГАК) из лиц ведущих исследователей в области профессиональной подготовки по профилю 02.00.04 «Физическая химия».

Блок	Базовая или вариативная часть	Семестр, в котором проводится ГИА	Трудоёмкость			Вид аттестации
			Зачётные единицы	Часы		
				Общая	В том числе СРС	
Блок 4	Базовая часть	8	9	324	324	1. Сдача государственного экзамена 2. Представление научного доклада о результатах НКР
Итого			9	324	324	

### 2.1. Программа итогового государственного экзамена

Государственный экзамен по специальной дисциплине проводится в соответствии с направлением подготовки федерального государственного образовательного стандарта.

Экзамен по специальной дисциплине должен носить комплексный характер и служить в качестве средства проверки конкретных функциональных возможностей аспиранта, способности его к самостоятельным суждениям на основе имеющихся знаний, общепрофессиональных и профессиональных компетенций, приобретенные за время обучения в аспирантуре. Экзамен носит комплексно-системный характер и ориентирует экзаменуемого на установление, выявление и обоснование системных связей между учебными дисциплинами, включенными в программу государственного экзамена.

Экзамен по направлению подготовки может проводиться как в устной, так и в письменной форме по билетам. Форма проведения экзамена утверждается программой государственного экзамена и проводится в присутствии членов Государственной аттестационной комиссии. На экзамене в основном должна быть проверена и оценена сформированность компетенций, необходимых для выполнения выпускником преподавательского вида деятельности.

На государственном экзамене проверяется сформированность следующих 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);

готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках (УК-4);

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-3).

способность творчески использовать полученные знания в области естественно научных дисциплин, применять, анализировать и развивать методы математической и теоретической физики, математического моделирования и теоретического исследования (ПК-1);

владение современными методами физической химии и молекулярного моделирования (ПК-2);

владение современными методами физико-химического исследования органических веществ, средствами планирования и организации исследований, проведения экспериментов, выдвижения гипотез и установления границ их применения (ПК-3);

умение проводить инновационные физико-химические исследования, включая критический анализ данных из мировых информационных ресурсов, сложный эксперимент, формулировку выводов в условиях неоднозначности с применением глубоких профессиональных знаний (ПК-4);

умение применять основные законы физической химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных (ПК-5).

## **ПЕРЕЧЕНЬ ВОПРОСОВ К ГОСУДАРСТВЕННОМУ ЭКЗАМЕНУ.**

Примерный список вопросов для оценки универсальных и общепрофессиональных компетенций (список вопросов на УК и ОПК):

1. Начала термодинамики. Внутренняя энергия. Теплообмен. Массоперенос. Физический смысл энтропии. Адиабатический и диабатический процессы.

2. Энтропия и энтальпия. Энергия Гиббса и направление протекания реакции. Правило фаз Гиббса. Равновесие термодинамической системы. Способы смещения равновесия. Понятие комплекса, константа устойчивости комплекса.

3. Взаимодействие света с веществом. Законы фотохимии. Пространственное строение вещества. Основное и возбуждённое состояния вещества, особенности распределения электронной плотности. Сольватация молекул в основном и возбуждённом состоянии, сольватохромизм.
4. Диаграмма Яблонского. Поглощение света веществом. Возбуждённое состояние молекул:  $S^*$  и T-уровни. Излучательные и безызлучательные процессы, время жизни. Количественная оценка излучательных процессов.
5. Образование агрегатов молекул в основном и возбужденном состояниях: виды агрегатов, особенности оптического отклика, причины. Статическое и динамическое тушение флуоресценции. Уравнение Штерна-Фольмера.
6. Характеристика процессов, протекающих на поверхности, адсорбция на границе раздела фаз, формирование слоёв на таких поверхностях. Понятие монослоя.
7. Физическая и химическая сорбция. Теория Лэнгмюра и модели для описания многослойной сорбции.
8. Диффузия и броуновское движение коллоидных частиц в растворе.
9. Пористые материалы. Понятие развитой поверхности. Диффузия. Способы формирования пористых материалов.
10. Перенос энергии в системах на основе органических красителей. Основные механизмы переноса энергии.
11. Кинетика фото процессов
12. Особенности фотохимических реакций.
13. Классификация фотохимических реакций.
14. Установление механизмов фотохимических реакций.
15. Промежуточные продукты фотохимических реакций
16. Окислительно-восстановительные фотохимические реакции
17. Фотохромизм. Основные типы процессов, протекающих в фотохромных системах под действием света.
18. Основные принципы построения сенсорных материалов. Флуоресцентные сенсорные материалы. Прямые и косвенные методы детектирование аналитов.
19. Одноканальный и многоканальный способ детектирования аналитов. Принципы ратиометрического анализа.
20. Сенсорные материалы на сольватохромных красителях. Основные недостатки и методы их устранения.
21. Что такое Стоксов сдвиг? Какова его природа и как его можно рассчитать методами квантовой химии? Какие квантово-химические приближения следует использовать?
22. Что такое энергия нулевых колебаний? В каких случаях требуется ее учет? Как рассчитать энергию нулевых колебаний для молекулы красителя? Изменится ли энергия нулевых колебаний молекулы красителя при образовании им комплекса с силикагелем?
23. Что такое эксимер/эксиплекс? При каких условиях образуются эксиплексы в органических светоизлучающих системах? Энергия связи

между компонентами эксимера/эксиплекса и её вклады в основном и возбуждённых состояниях. Какие квантово-химические методы следует использовать для расчета эксиплексов с переносом заряда и без него?

24. Назначение математического моделирования и компьютерного эксперимента в физической химии с использованием программных пакетов квантовой химии, молекулярной динамики и др.; соотношение моделирования и эксперимента. Пояснить на примерах.

25. Теория Дебая-Хюккеля и электростатическая часть взаимодействия коллоидных частиц.

26. Какие методы моделирования можно использовать для расчета взаимодействия больших упорядоченных массивов молекул, например, плоских кристаллических монослоев?

27. Какие методы моделирования оптимально использовать для расчета взаимодействия больших неупорядоченных массивов молекул, например, двух наночастиц?

28. Классификация молекулярных спектров. Методы расчета спектров молекул.

29. Квантово-химические методы расчета оптических спектров органических красителей в растворах. Расчеты колебательных спектров. Расчеты спектров электронного поглощения. Электронно-колебательные спектры и форма линий

30. Методы функционала плотности и *ab initio*. Преимущества и недостатки. Области оптимального применения.

Примерный список вопросов для оценки профессиональных компетенций (список вопросов на ПК):

1. Нарисуйте спектр поглощения и флуоресценции любого красителя. Почему они будут выглядеть так? Что изменится при переходе от неполярного растворителя к полярному?

2. Предложите способы создания долгоживущего излучательного состояния молекулы.

3. Рассчитайте энергию кванта света для молекулы, максимум длинноволновой полосы поглощения которой равен 500 нм. В каком состоянии будет молекула после поглощения кванта света?

4. Объясните разницу между физической и химической сорбцией. Нарисуйте вид изотермы Ленгмюра для микропористых твёрдых тел.

5. Гидрофильность и гидрофобность поверхности. Объясните на примере. Можно ли изменить свойства поверхности? Поясните.

6. Как рассчитать спектр люминесценции красителя, адсорбированного на поверхности наночастицы силикагеля (покажите на примере красителя Нильский Красный)? Какие методы квантовой химии следует использовать? Как оценить энергию адсорбции красителя на силикагеле? Какие методы следует использовать?

7. Краситель, адсорбированный на поверхности наночастицы силикагеля, взаимодействует с ацетоном. Как рассчитать сдвиг полосы поглощения красителя? Какие квантово-химические методы следует использовать? В какую сторону (длинноволновую или коротковолновую) Вы предполагаете сдвиг спектра (покажите на примере красителя Нильский Красный)? Почему?
8. Как оценить энергию образования супрамолекулярного комплекса включения краситель-кавитанд? Наиболее широко применяемые кавитанды. Какие расчеты следует выполнить? Какие квантово-химические методы, по Вашему мнению, должны дать наиболее правдоподобный результат? Гидрофобное взаимодействие. Проблема учета растворителя.
9. Как рассчитать сольватохромных сдвиг спектра красителя в растворителях, способных к специфическим взаимодействиям? Какие модели и расчетные приближения следует использовать?
10. Органический краситель образует димер. Как изменятся спектр поглощения и спектр люминесценции красителя? В какую сторону (длинноволновую или коротковолновую) Вы предполагаете сдвиг спектров? Почему?
11. Вам необходимо рассчитать спектр люминесценции органического красителя в растворе толуола. Какие расчеты для этого необходимо выполнить? Какие методы расчета следует использовать? Как учесть влияние растворителя? Обоснуйте Ваш ответ.
12. Предложите стратегию исследования оптических свойств флуоресцентного материала, полученного с помощью золь-гель синтеза. Какие основные методы исследования вы будете использовать и почему?
13. Предложите стратегию исследования свойств коллоидных растворов, состоящих из флуоресцентных наночастиц.
14. Сравните между собой различные методы нанесения покрытий на поверхности твердых подложек. Перечислите факторы, ограничивающие использование каждого метода.
15. Понятие отклика сенсорного материала. Основные метрологические параметры, по которым можно сравнить отклики сенсорного материала на присутствие аналитов.

## **2.2. Требования и критерии оценивания ответов итогового государственного экзамена**

1. В процессе государственного экзамена оценивается уровень педагогической и исследовательской компетентности аспиранта, что проявляется в квалифицированном представлении результатов обучения.
2. При определении оценки учитывается грамотность представленных ответов, стиль изложения и общее оформление, способность ответить на поставленный вопрос по существу.
3. Критерии оценок государственного экзамена:  
«Отлично» – соответствует исчерпывающему изложению и содержанию вопроса. Аспирант демонстрирует как знание, так и понимание вопроса, а



также проявляет способность применить педагогические, исследовательские и информационные компетенции на практике по профилю своего обучения. «Хорошо» – оценка, которая в основных чертах отражает содержание вопроса. 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.

«Удовлетворительно» – оценка, которая в основных чертах отражает содержание вопроса, но допускаются ошибки. Не все положения раскрыты полностью. Имеются фактические пробелы и не полное владение литературой. Нарушаются нормы философского языка; имеется нечеткость и двусмысленность письменной речи. Слабая практическая применимость педагогических, исследовательских и информационных компетенций по профилю своего обучения.

«Неудовлетворительно» – оценка, которую получает обучающийся не раскрыв содержание вопроса. Имеются грубые ошибки, а также незнание ключевых определений и литературы. Ответы не носят развернутого изложения темы, на лицо отсутствие практического применения педагогических, исследовательских и информационных компетенций на практике по профилю своего обучения.

Аспиранты, получившие по результатам государственного экзамена оценку «неудовлетворительно», не допускаются к государственному аттестационному испытанию – защите выпускной квалификационной работы.

### **2.3. Представление научного доклада**

Представление научного доклада является представлением результатов научно-исследовательской работы, выполненной обучающимся в ходе обучения в аспирантуре. Представление научного доклада состоит собственно из десятиминутного научного доклада и последующих ответов обучающегося на вопросы членов Государственной аттестационной комиссии по теме работы. Цель представления научного доклада - демонстрация степени готовности выпускника к ведению профессиональной научно-исследовательской и научно-педагогической деятельности.

В ходе представления научного доклада у обучающегося проверяется степень освоения 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 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 (УК-4);  
способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития (УК-5);  
готовность организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук (ОПК-2);  
способность творчески использовать полученные знания в области естественно научных дисциплин, применять, анализировать и развивать методы математической и теоретической физики, математического моделирования и теоретического исследования (ПК-1);  
владение современными методами физической химии и молекулярного моделирования (ПК-2);  
владение современными методами физико-химического исследования органических веществ, средствами планирования и организации исследований, проведения экспериментов, выдвижения гипотез и установления границ их применения (ПК-3);  
умение проводить инновационные физико-химические исследования, включая критический анализ данных из мировых информационных ресурсов, сложный эксперимент, формулировку выводов в условиях неоднозначности с применением глубоких профессиональных знаний (ПК-4);  
умение применять основные законы физической химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных (ПК-5).

Выполненная аспирантом научно-исследовательская работа на основании которой представляется научный доклад, должна соответствовать критериям, установленным для научно-квалификационной работы (диссертации) на соискание ученой степени кандидата наук. При оценивании научного доклада ГАК рассматривает такие критерии, как актуальность и новизна научного исследования, достоверность представленных в докладе данных и корректность их обобщения, логичность построения доклада, а также научная эрудиция обучающегося (определяется в ходе ответов докладчика на вопросы членов ГАК). Результаты представления научного доклада определяются оценками «защищено», «не защищено». Оценка «защищено» означает успешное прохождение представления научного доклада.

Обучающийся считается успешно прошедшим Государственную итоговую аттестацию аспиранта в том случае, если он получает положительную оценку на Государственном экзамене ГИА и оценку «Защищено» на представлении научного доклада по результатам научно-исследовательской работы в аспирантуре.

## 2.4 Компетенции, проверяемые государственной итоговой аттестацией.

Проверка компетенций по видам ГИА:

Подготовка к сдаче и сдача государственного экзамена	УК-1,УК-4, ОПК-1, ОПК-3; ПК-1, ПК-2, ПК-3, ПК-4, ПК-5.
Представление научного доклада о результатах НКР (диссертации)	ОПК-2, УК-1, УК-2, УК-3, УК-4, УК-5, ПК-1, ПК-2, ПК-3, ПК-4, ПК-5

### 3. Порядок проведения апелляции

По результатам государственных аттестационных испытаний обучающийся имеет право на апелляцию. Обучающийся имеет право подать в апелляционную комиссию в письменном виде апелляцию о нарушении, по его мнению, установленной процедуры проведения государственного аттестационного испытания. Регламент назначения апелляционной комиссии, сроков подачи на апелляцию, регламент работы апелляционной комиссии и проведения самой процедуры апелляции определяется Положением о государственной итоговой аттестации научно-педагогических кадров высшей квалификации (аспирантура) ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН.

### 4. Учебно-методическое и информационное обеспечение

#### Основная литература:

1. Экспериментальные методы химии высоких энергий. Под ред. М.Я. Мельникова - Москва: МГУ, 2009
2. Стромберг, А.Г., Семченко, Д.П. Физическая химия - Москва: изд. Высшая школа, 1999.
3. Рабек Я. Экспериментальные методы в фотохимии и фотофизике. В двух томах. - Москва: Мир, 1985
4. . Калверт, Дж., Питтс, Дж. Фотохимия. - Москва: Мир, 1968
5. Ягодковский В.Д. Статистическая термодинамика в физической химии.- Москва: Бином,2005.
6. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Статистическая физика, часть 2 / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – Москва: Физико-математическая литература, 2000.
7. В.Г. Цирельсон, Квантовая химия, молекулы, молекулярные системы, твердые тела. М.: Бином. Лаборатория знаний, 2010.
8. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. - Москва: МИР, 2001
9. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. - Москва: Наука, 1989

10.Краснов К.С. Молекулы и химическая связь. - Москва: изд. Высшая школа, 1984

### **Дополнительная литература:**

1. Марпл-мл, С.Л. Цифровой спектральный анализ и его применение - Москва: изд. Мир, 1990
2. Руководство по экспериментальным методам исследований при разработке и экспертизе лекарственных препаратов - под ред. С.Н. Быковского, Москва: изд Перо, 2014
3. Электронная спектроскопия. под ред. И.Б. Боровского - Москва: Мир, 1971
4. Балтроп Дж., Койл Дж. Возбужденные состояния в органической химии. - Москва: Мир, 1978
5. Пюльман Б., Пюльман А. Квантовая биохимия. - Москва: изд. Мир, 1965
6. Робертс, Дж. Расчёты по методу молекулярных орбит. - Москва: Издательство иностранной литературы, 1963.
7. Гуггенгейм, Э., Пру, Дж. Физико-химические расчёты - Москва: Издательство иностранной литературы, 1958.

### **Программное обеспечение и Интернет-ресурсы**

<http://www.chemhelper.com/mechanisms.html>  
<http://www.chemguide.co.uk/mechmenu.html>  
<http://www.chem.ox.ac.uk/vrchemistry/iom/>  
<http://crab.rutgers.edu/~alroche/MechanismInOrgChem.html>  
<http://www.nanoware.ru/>  
<http://www.nanonewsnet.ru>  
<http://nanoblog.ru>  
<http://www.nanometer.ru>  
<http://www.nano-technology.org>  
<http://www.nanojournal.ru>  
<http://www.chem.asu.ru/org/supramol/programm.html>  
[http://www.chemistrydaily.com/chemistry/Supramolecular\\_chemistry](http://www.chemistrydaily.com/chemistry/Supramolecular_chemistry)  
<http://www.freebookcentre.net/Chemistry/SupraMolecular-Chemistry-Books.html>