



Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Нижегородский государственный технический университет им.Р.Е.Алексеева»

Программа кандидатского экзамена

СК-РП-15.1-04-22

Факультет подготовки специалистов высшей квалификации



УТВЕРЖДАЮ
Проректор по научной работе

А.А. Куркин

«30» марта 2022 г

ПРОГРАММА КАНДИДАТСКОГО ЭКЗАМЕНА

ПО СПЕЦИАЛЬНОСТИ 1.4.4
«ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

Область науки:

1. Естественные науки

Группа научных специальностей:

1.4. Химические науки

Наименование отрасли науки, по которой
присуждаются ученые степени:

химические науки
технические науки

Научная специальность

1.4.4. «Физическая химия»

Нижний Новгород 2022

	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
	федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им.Р.Е.Алексеева»
	Программа кандидатского экзамена
СК-РП-15.1-04-22	Факультет подготовки специалистов высшей квалификации

Программа предназначена для методического сопровождения процесса подготовки аспирантов (соискателей) к сдаче кандидатского экзамена по специальности 1.4.4. «Физическая химия»

Программа составлена в соответствии с требованиями следующих нормативных документов:

1. Федеральные государственные требования к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре - приказ Минобрнауки России от 20.10.2021 г. № 951.
2. Паспорт научной специальности 1.4.4 «Физическая химия», разработанный экспертами ВАК Минобрнауки России в рамках Номенклатуры научных специальностей, утвержденной приказом Минобрнауки России от 24.02.2021 г. № 118.
3. Учебный план НГТУ по программе подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре по научной специальности 1.4.4. «Физическая химия»

РЕКОМЕНДОВАНА кафедрой «Нанотехнологии и биотехнологии»

протокол № 5 от " 29 " марта 2022 г.

И.о. заведующего кафедрой «НБ»

К.х.н, доц.  Калинина А.А.
подпись расшифровка подписи

СОГЛАСОВАНО:

И.о. декана факультета подготовки специалистов высшей квалификации

 Трубочкина Е.Л. «30» марта 2022 г.
личная подпись расшифровка подписи дата

	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
	<i>«Нижегородский государственный технический университет им.Р.Е.Алексеева»</i>
	Программа кандидатского экзамена
СК-РП-15.1-04-22	Факультет подготовки специалистов высшей квалификации

СОДЕРЖАНИЕ

1	Общие положения	4
2	Программа кандидатского экзамена по специальности 1.4.4 «Физическая химия»	4
3	Дополнительная программа	11
	Приложение. Пример оформления дополнительной программы	12

	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
	<i>«Нижегородский государственный технический университет им.Р.Е.Алексеева»</i>
	Программа кандидатского экзамена
СК-РП-15.1-04-22	Факультет подготовки специалистов высшей квалификации

1 Общие положения

Программа кандидатского экзамена по специальной дисциплине состоит из двух частей:

- 1) основная программа по специальности, разработанной в соответствии с паспортом научной специальности 1.4.4 – Физическая химия;
- 2) дополнительной программы, разрабатываемой аспирантом (соискателем).

Экзаменационные билеты должны включать 2-3 вопроса из основной программы и 1-2 вопроса из дополнительной программы.

2 Программа кандидатского экзамена по специальности 1.4.4 «Физическая химия»

Программа составлена в соответствии с паспортом специальности 1.4.4 «Физическая химия», с опорой на учебный план по дисциплине «Физическая химия», отдельных глав курсов по теории строения вещества, квантовой химии НГТУ им. Р.Е. Алексеева

2.1. Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений, а также их спектральных характеристик

Дипольный момент и поляризуемость молекул. Магнитный момент и магнитная восприимчивость. Эффекты Штарка и Зеемана. Магнитно-резонансные методы исследования строения молекул. Химический сдвиг. Оптические спектры молекул. Вероятности переходов и правила отбора при переходах между различными квантовыми состояниями молекул. Связь спектров молекул с их строением. Определение структурных характеристик молекул из спектроскопических данных.

Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий. Молекулярные комплексы. Ван-дер-ваальсовы молекулы. Кластеры атомов и молекул. Водородная связь. Супермолекулы и супрамолекулярная химия. Строение молекул простых и координационных неорганических соединений. Полиядерные комплексные соединения. Строение основных типов органических и элементоорганических соединений. Соединения включения. Полимеры и биополимеры. Структурная классификация конденсированных фаз. Идеальные кристаллы. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах. Кристаллы с неполной упорядоченностью. Доменные структуры. Симметрия кристаллов. Кристаллографические точечные группы симметрии, типы решеток, сингонии. Понятие о пространственных группах кристаллов. Индексы кристаллографиче-

	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
	федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им.Р.Е.Алексеева»
	Программа кандидатского экзамена
СК-ПП-15.1-04-22	Факультет подготовки специалистов высшей квалификации

ских граней. Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов. Цепочечные, каркасные и слоистые структуры. Строение твердых растворов. Упорядоченные твердые растворы. Аморфные вещества. Особенности строения полимерных фаз. Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов. Поверхность Ферми. Различные типы проводимости. Колебания в кристаллах. Фононы. Жидкости. Мгновенная и колебательно усреднённая структура жидкости. Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Флуктуации и корреляционные функции. Структура простых жидкостей. Растворы неэлектролитов. Структура воды и водных растворов. Структура жидких электролитов. Мицеллообразование и строение мицелл. Мезофазы. Пластические кристаллы. Жидкие кристаллы (нематики, смектики, холестеррики и др.).

2.2. Экспериментальное определение термодинамических свойств веществ, расчет термодинамических функций простых и сложных систем, в том числе на основе методов статистической термодинамики, изучение термодинамических аспектов фазовых превращений и фазовых переходов.

Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, интенсивные и экстенсивные переменные. Уравнения состояния. Теорема о соответственных состояниях. Вириальные уравнения состояния. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия, теплоемкость. Закон Гесса. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгоффа. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах. Энтропия и её изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно – Клаузиуса. Различные шкалы температур. Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца. Уравнения Максвелла. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов. Уравнение Гиббса – Гельмгольца. Работа и теплота химического процесса. Химические потенциалы. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций. Приведенная энергия Гиббса и её использование для расчетов химических равновесий. Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса. Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды, серы, фосфора и углерода. Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона – Клаузиуса. Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Равновесие жидкость – пар в двухкомпонентных системах. Зако-

	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
	федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им.Р.Е.Алексеева»
	Программа кандидатского экзамена
СК-ПП-15.1-04-22	Факультет подготовки специалистов высшей квалификации

ны Гиббса – Коновалова. Азеотропные смеси. Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста. Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.

2.3. Определение термодинамических характеристик процессов на поверхности, установление закономерностей адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях

Адсорбент, адсорбат. Виды адсорбции. Структура поверхности и пористость адсорбента. Локализованная и делокализованная адсорбция. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Динамический характер адсорбционного равновесия. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Ленгмюра. Адсорбция из растворов. Уравнение Брунауэра – Эмета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента. Хроматография, различные её типы (газовая, жидкостная, противоточная и др.). Свободная поверхностная энергия, поверхностное натяжение, избыточные термодинамические функции поверхностного слоя. Изменение поверхностного натяжения на границе жидкость – пар в зависимости от температуры. Связь свободной поверхностной энергии с теплотой сублимации (правило Стефана), модулем упругости и другими свойствами вещества. Эффект Ребиндера: изменение прочности и пластичности твердых тел вследствие снижения их поверхностной энергии. Капиллярные явления. Зависимость давления пара от кривизны поверхности жидкости. Капиллярная конденсация. Зависимость растворимости от кривизны поверхности растворяющихся частиц (закон Гиббса – Оствальда – Фрейндлиха). Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей, структура границы раздела конденсированных фаз. Молекулы и кластеры на поверхности. Структура адсорбционных слоев.

2.4. Теория растворов, межмолекулярные и межчастичные взаимодействия. Компьютерное моделирование строения, свойств и спектральных характеристик молекул и их комплексов в простых и непростых жидкостях, а также ранних стадий процессов растворения и зародышеобразования

Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение. Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонент растворов. Симметричная и несимметричная системы отсчета.

Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия. Зонная плавка. Осмотические явления. Парциальные мольные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса – Дюгема.

	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
	федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им.Р.Е.Алексеева»
	Программа кандидатского экзамена
СК-РП-15.1-04-22	Факультет подготовки специалистов высшей квалификации

Функция смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства. Растворы электролитов. Ион-дипольное взаимодействие, как основной процесс, определяющий устойчивость растворов электролитов. Коэффициенты активности в растворах электролитов. Средняя активность и средний коэффициент активности, их связь с активностью отдельных ионов. Основные положения теории Дебая – Хюккеля. Потенциал ионной атмосферы. Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и в электрохимической цепи. Термодинамика гальванического элемента. Электродвижущая сила, её выражение через энергию Гиббса реакции в элементе. Уравнения Нернста и Гиббса – Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи. Понятие электродного потенциала. Определение коэффициентов активности на основе измерений ЭДС гальванического элемента. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты.

2.5. Изучение физико-химических свойств изолированных молекул и молекулярных соединений при воздействии на них внешних электромагнитных полей, потока заряженных частиц, а также экстремально высоких/низких температурах и давлениях.

Равновесие в поле внешних сил. Полные потенциалы. Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые Г- и μ -пространства. Эргодическая гипотеза.

2.6. Химические превращения, потоки массы, энергии и энтропии пространственных и временных структур в неравновесных системах.

Термодинамическая вероятность и её связь с энтропией. Распределение Максвелла – Больцмана. Статистические средние значения макроскопических величин. Ансамбли Гиббса. Микроканоническое и каноническое распределения. Расчет числа состояний в квазиклассическом приближении. Каноническая функция распределения Гиббса. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция. Статистические выражения для основных термодинамических функций. Молекулярная сумма по состояниям и сумма по состояниям макроскопической системы. Поступательная, вращательная, электронная и колебательная суммы по состояниям. Статистический расчет энтропии. Постулат Планка и абсолютная энтропия. Приближение «жесткий ротатор – гармонический осциллятор». Составляющие внутренней энергии, теплоёмкости и энтропии, обусловленные поступательным, вращательным и колебательным движением. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики. Статистическая термодинамика реальных систем. Потенциалы межмолекулярного взаимодействия и конфигурационный интеграл для реального газа. Распределения Бозе – Эйнштейна и Ферми – Ди-

	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
	федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им.Р.Е.Алексеева»
	Программа кандидатского экзамена
СК-ПП-15.1-04-22	Факультет подготовки специалистов высшей квалификации

рака. Вырожденный идеальный газ. Электроны в металлах. Уровень Ферми. Статистическая теория Эйнштейна идеального кристалла, теория Дебая. Точечные дефекты кристаллических решеток. Равновесные и неравновесные дефекты. Вычисление сумм по состояниям для кристаллов с различными точечными дефектами. Нестехиометрические соединения и их термодинамическое описание. Основные положения термодинамики неравновесных процессов. Локальное равновесие. Флуктуации. Функция диссипации. Потoki и силы. Скорость производства энтропии. Зависимость скорости производства энтропии от обобщенных потоков и сил. Соотношения взаимности Онсагера. Стационарное состояние системы и теорема Пригожина. Термодиффузия и её описание в неравновесной термодинамике. Уравнение Чепмена – Энско-го.

2.7. Макрокинетика, механизмы сложных химических процессов, физико-химическая гидродинамика, растворение и кристаллизация

Простые и сложные реакции, молекулярность и скорость простой реакции. Основной постулат химической кинетики. Способы определения скорости реакции. Кинетические кривые. Кинетические уравнения. Константа скорости и порядок реакции. Реакции переменного порядка. Кинетика сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций. Квазистационарное приближение. Метод Боденштейна – Тёмкина. Кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса – Ментен. Цепные реакции. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций. Кинетические особенности разветвленных цепных реакций. Предельные явления в разветвленных цепных реакциях. Полуостров воспламенения, период индукции. Тепловой взрыв. Реакции в потоке. Реакции идеального вытеснения и идеального смешения. Колебательные реакции. Роль диффузии в кинетике гетерогенных реакций. Кинетика гетерогенных каталитических реакций. Различные режимы протекания реакций (кинетическая и внешняя кинетическая области, области внешней и внутренней диффузии). Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы её определения.

2.8. Динамика элементарного акта химических реакций. Механизмы реакции с участием активных частиц. Связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями протекания химической реакции.

Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации. Термический и нетермические пути активации молекул. Обмен энергией (поступательной, вращательной и колебательной) при столкновениях молекул. Время релаксации в молекулярных системах. Теория активных столкновений. Сечение химических реакций. Формула Траутца – Льюиса. Расчет предэкспоненциального мно-

	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
	федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им.Р.Е.Алексеева»
	Программа кандидатского экзамена
СК-ПП-15.1-04-22	Факультет подготовки специалистов высшей квалификации

жителя по молекулярным постоянным. Стерический фактор. Теория переходного состояния (активированного комплекса). Поверхность потенциальной энергии. Путь и координата реакции. Статистический расчет константы скорости. Энергия и энтропия активации. Использование молекулярных постоянных при расчете константы скорости. Различные типы химических реакций. Мономолекулярные реакции в газах, схема Линдемана – Христиансена. Теория РРKM. Бимолекулярные и тримолекулярные реакции, зависимость предэкспоненциального множителя от температуры. Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц. Клеточный эффект и сольватация. Фотохимические и радиационнохимические реакции. Элементарные фотохимические процессы. Эксимеры и эксиплексы. Изменение физических и химических свойств молекул при электронном возбуждении. Квантовый выход. Закон Эйнштейна – Штарка.

2.9 Создание и разработка методов компьютерного моделирования строения и механизмов превращений химических соединений на основе представлений квантовой механики, различных топологических и статистических методов, включая методы машинного обучения, методов молекулярной механики и молекулярной динамики, а также подходов типа структура-свойства.

Интерпретация строения молекул на основе орбитальных моделей и исследования распределения электронной плотности. Локализованные молекулярные орбитали. Гибридизация. Электронная корреляция в атомах и молекулах. Её проявления в свойствах молекул. Метод конфигурационного взаимодействия. Представления о зарядах на атомах и порядках связей. Различные методы выделения атомов в молекулах. Корреляции дескрипторов электронного строения и свойств молекул. Индексы реакционной способности. Теория граничных орбиталей. Точечные группы симметрии молекул. Понятие о представлениях групп и характерах представлений. Общие свойства симметрии волновых функций и потенциальных поверхностей молекул. Классификация квантовых состояний атомов и молекул по симметрии. Симметрия атомных и молекулярных орбиталей, σ - и π -орбитали. π -Электронное приближение. Влияние симметрии равновесной конфигурации ядер на свойства молекул и их динамическое поведение. Орбитальные корреляционные диаграммы. Сохранение орбитальной симметрии при химических реакциях.

2.10. Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, реакционной способности и динамике превращений химических соединений, находящихся в различном окружении, в том числе в кластерах, клатратах, твердых и жидкокристаллических матрицах, в полостях конденсированных среды и белковом окружении.

	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
	федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им.Р.Е.Алексеева»
	Программа кандидатского экзамена
СК-РП-15.1-04-22	Факультет подготовки специалистов высшей квалификации

Основные положения классической теории химического строения. Структурная формула и граф молекулы. Изомерия. Конформации молекул. Связь строения и свойств молекул. Механическая модель молекулы. Потенциалы парных взаимодействий. Методы молекулярной механики и молекулярной динамики при анализе строения молекул. Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Стационарное уравнение Шрёдингера для свободной молекулы. Адиабатическое приближение. Электронное волновое уравнение. Потенциальные кривые и поверхности потенциальной энергии. Их общая структура и различные типы. Равновесные конфигурации молекул. Структурная изомерия. Оптические изомеры. Колебания молекул. Нормальные колебания, амплитуды и частоты колебаний, частоты основных колебательных переходов. Колебания с большой амплитудой. Вращение молекул. Различные типы молекулярных волчков. Вращательные уровни энергии. Электронное строение атомов и молекул. Одноэлектронное приближение. Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Правило Хунда. Электронная плотность. Распределение электронной плотности в двухатомных молекулах. Корреляционные орбитальные диаграммы. Теорема Купманса. Пределы применимости одноэлектронного приближения.

2.11. Список литературы

1. Вилков Л. В., Пентин Ю. А. Физические методы исследования в химии. М.: Изд-во МГУ. Ч. 1. 1987. Ч. 2. 1989.
2. Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Теория строения молекул. Ростов-Дон: Феникс. 1997.
3. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, Изд-во МГУ. 2001.
4. Фларри Р. Квантовая химия. М.: Мир. 1985.
5. Полторак О. М. Термодинамика в физической химии М.: Высшая школа. 1991
6. Смирнова Н. А. Методы статистической термодинамики в физической химии. М.: Высшая школа. 1982.
7. Агеев Е. П. Неравновесная термодинамика в вопросах и ответах. М.: Химический ф-т МГУ. 1999.
8. Даниэльс Ф. Олберти Р. Физическая химия. М.: Мир. 1978.
9. Еремин, В.В., Каргов, С.И., Успенская, И.А. Основы физической химии/В.В. Еремин, С.И. Каргов, И.А. Успенская – М.: Лаборатория знаний, 2021.
10. Стромберг, А.Г. Физическая химия/А.Г. Стромберг, Д.П. Семченко – М.: Высшая школа, 2009.
11. Эткинс, П. Физическая химия. Т.1,2/ П. Эткинс. – М.: Мир, 2007.

	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
	<i>«Нижегородский государственный технический университет им.Р.Е.Алексеева»</i>
	Программа кандидатского экзамена
СК-РП-15.1-04-22	Факультет подготовки специалистов высшей квалификации

3 Дополнительная программа

Дополнительная программа, самостоятельно составляемая аспирантом (соискателем), включает в себя титульный лист, не менее 15 вопросов по теме диссертации и не менее 15 источников литературы. Дополнительная программа должна быть подписана научным руководителем и согласована с деканом факультета подготовки специалистов высшей квалификации. Пример оформления дополнительной программы приведен в Приложении.

	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
	федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им.Р.Е.Алексеева»
	Программа кандидатского экзамена
СК-РП-15.1-04-22	Факультет подготовки специалистов высшей квалификации

ПРИЛОЖЕНИЕ

Пример оформления дополнительной программы

Минобрнауки России

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

**НИЖЕГОРОДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМ. Р.Е. АЛЕКСЕЕВА**

УТВЕРЖДАЮ

Декан ФСВК

_____ Р.Ш. Бедретдинов

«__» _____

Дополнительная программа

к кандидатскому экзамену

по специальности 02.00.04 – Физическая химия

Нижний Новгород 2022

	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им.Р.Е.Алексеева»
	Программа кандидатского экзамена
	СК-РП-15.1-04-22
Факультет подготовки специалистов высшей квалификации	

Дополнительная программа экзамена по специальности

1. Приборы для контроля физико-химических свойств тонких пленок.
2. Основы статистической физики. Функция распределения Ферми-Дирака. Распределение Бозе-Эйнштейна. Распределение Максвелла-Больцмана.
3. Кристаллические и аморфные тела. Элементарная ячейка. Ячейка Вигнера – Зейтца. Решётка Бравэ. Закон Вульфа-Брэгга. Зоны Бриллюэна.
4. Просвечивающая и растровая электронная микроскопия, анализ фазового состава, микроструктуры и дефектов кристаллического строения.
5. Дипольный момент и поляризуемость молекул. Магнитный момент и магнитная восприимчивость. Эффекты Штарка и Зеемана. Магнитно-резонансные методы исследования строения молекул.
6. Сканирующая зондовая микроскопия: общие принципы; туннельная, атомно-силовая, электросиловая, магнитно-силовая зондовая микроскопия.
7. Спектроскопические методы анализа материалов. Спектры. ИК-Фурье-, рамановская, Оже-, магниторезонансная, масс-, мёссбауэровская спектроскопия.
8. Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы её определения.
9. Сорбент, сорбат. Виды сорбции. Структура поверхности и пористость сорбента.
10. Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей, структура границы раздела конденсированных фаз. Молекулы и кластеры на поверхности. Структура адсорбционных слоев.
11. Хроматография, различные её типы (газовая, жидкостная, противоточная и др.).
12. Вырожденный идеальный газ. Электроны в металлах. Уровень Ферми. Статистическая теория Эйнштейна идеального кристалла, теория Дебая.
13. Идеальные кристаллы. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах. Кристаллы с неполной упорядоченностью. Доменные структуры.
14. Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов. Поверхность Ферми. Различные типы проводимости. Колебания в кристаллах. Фононы.
15. Первый и второй закон термодинамики. Закон Гесса. Формула Кирхгофа. Теорема Карно – Клаузиуса.

	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им.Р.Е.Алексеева»
	Программа кандидатского экзамена
	СК-РП-15.1-04-22
Факультет подготовки специалистов высшей квалификации	

Список литературы

1. Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников. – М., Наука, 1977.
2. Пасынков В.В., Чиркин Л.К. Полупроводниковые приборы. – СПб, «Лань», 2002.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. – М.: Наука, 1976.
4. Воронов В.К., Подопделов А.В. Современная физика: Конденсированное состояние: Учебное пособие. – М.: Издательство ЛКИ, 2008.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. – М.: Наука, 1976.
6. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии. – М.: Изд-во МГУ. Ч. 1. 1987. Ч. 2. 1989.
7. Фотоприемники видимого и ИК диапазонов. Под ред. Стафеева В.И. – М., Радио и связь, 1985.
8. Драгунов В.П., Неизвестный И.Г., Гридчин В.А. Основы наноэлектроники. –Новосибирск, НГТУ, 2000.
9. Уманский Я.С., Скаков Ю.А., Иванов А.Н., Расторгуев Л.Н. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. – М.: Металлургия, 1982.
10. Воротынцев В.М., Скупов В.Д. Базовые технологии микро- и наноэлектроники: учебное пособие. – Н.Новгород: Нижегород.гос. техн. ун-т, 2015.
11. Полторак О.М. Термодинамика в физической химии. – М.: Высшая школа. 1991.
12. Смирнова Н.А. Методы статистической термодинамики в физической химии. – М.: Высшая школа. 1982.
13. Адамсон А. Физическая химия поверхностей. – М.: Мир. 1979.
14. Цирельсон В.Г., Зоркий П.М. Распределение электронной плотности в кристаллах органических соединений. Итоги науки и техники. Кристаллохимия. – М.: ВИНТИ. 1986.
15. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. – М.: Мир, Изд-во МГУ. 2001.

Научный руководитель
д.х.н., профессор

В.М. Воротынцев