

ВОПРОСЫ

для подготовки к государственному экзамену по специальности 04.05.01

«Фундаментальная и прикладная химия»

1. Аналитическая химия

1. Атомно-эмиссионная спектроскопия. Основные понятия и суть метода. Достоинства и недостатки. Способы получения спектров, аппаратура и метрологические характеристики. Традиционные приемы пробоподготовки при проведении анализа. Примеры использования метода в аналитической практике.
2. Атомно-абсорбционная спектрометрия. Основные понятия и суть метода. Достоинства и недостатки. Способы атомизации, аппаратура и метрологические характеристики. Традиционные приемы пробоподготовки при проведении анализа. Примеры использования метода в аналитической практике.
3. Флуориметрия. Основные понятия и суть метода. Достоинства и недостатки. Способы получения спектров, аппаратура и метрологические характеристики. Традиционные приемы пробоподготовки при проведении анализа. Примеры использования метода в аналитической практике.
4. Масс-спектрометрия. Основные понятия и суть метода. Достоинства и недостатки. Способы получения спектров, аппаратура и метрологические характеристики. Традиционные приемы пробоподготовки при проведении анализа. Примеры использования метода в аналитической практике.
5. Спектрофотометрия. Основные понятия и суть метода. Достоинства и недостатки. Способы получения спектров, аппаратура и метрологические характеристики. Традиционные приемы пробоподготовки при проведении анализа. Примеры использования метода в аналитической практике.
6. Вольтамперометрия. Основные понятия и суть метода. Достоинства и недостатки. Варианты метода. Аппаратура и метрологические характеристики. Традиционные приемы пробоподготовки при проведении анализа. Примеры использования метода в аналитической практике.
7. Потенциометрия. Основные понятия и суть метода. Достоинства и недостатки. Варианты метода. Аппаратура и метрологические характеристики. Традиционные приемы пробоподготовки при проведении анализа. Примеры использования метода в аналитической практике.
8. Кулонометрия. Основные понятия и суть метода. Достоинства и недостатки. Варианты метода. Аппаратура и метрологические характеристики. Традиционные приемы пробоподготовки при проведении анализа. Примеры использования метода в аналитической практике.
9. Газовая хроматография. Основные понятия и суть метода. Варианты метода. Достоинства и недостатки. Аппаратура и метрологические характеристики. Традиционные приемы пробоподготовки при проведении анализа. Примеры использования метода в аналитической практике.
10. Высокоэффективная жидкостная хроматография. Основные понятия и суть метода. Достоинства и недостатки. Аппаратура и метрологические характеристики. Традиционные приемы пробоподготовки при проведении анализа. Примеры использования метода в аналитической практике.

2. Биоорганическая химия

1. Структурная организация белков. Принципы действия ферментов.
2. Химический синтез олигодезокси- и олигорибонуклеотидов. Амидофосфитный метод создания межнуклеотидной связи. Автоматизация процесса синтеза.
3. Методы разделения, обнаружения и идентификации биополимеров.
4. Молекулярные основы генетической инженерии.
5. Современные методы анализа пространственной структуры белков и нуклеиновых кислот и их взаимодействия с малыми молекулами.
6. Структура и функции нуклеиновых кислот. Современные подходы к секвенированию ДНК и РНК.
7. Репликация и ее регуляция. Клеточный цикл.
8. Биосинтез РНК. Транскрипция и ее регуляция. Созревание РНК.
9. Трансляция. Сравнение механизмов трансляции у прокариот и эукариот.
10. Взаимодействие клеток в многоклеточном организме. Межклеточная коммуникация. Сигнальные каскады

3. Высокомолекулярные соединения

1. Понятие гибкости, ее связь с молекулярной массой и химической природой макромолекул.
2. Синтез полимеров из мономеров по цепному механизму: классификация реакций полимеризации и их сравнительный анализ.
3. Синтез полимеров из мономеров по ступенчатому механизму; примеры конденсационных полимеров; способы регулирования их молекулярной массы.
4. Химические реакции полимеров: классификация и примеры.
5. Полимераналогичные превращения: факторы, влияющие на кинетику полимераналогичных реакций.
6. Деструкция полимеров: цепная и по закону случая.
7. Типы фазовых диаграмм полимер – растворитель, понятие о верхней и нижней критической температуре растворения. Уравнение состояния полимера в растворе. Θ -растворитель и Θ -температура.
8. Гидродинамические свойства разбавленных растворов полимеров. Применение вискозиметрии для определения молекулярной массы полимера и средних размеров макромолекул.
9. Растворы полиэлектролитов: термодинамика и особенности гидродинамического поведения в водных и водно-солевых средах.
10. Физико-механические свойства кристаллических полимеров

4. Коллоидная химия

1. Термодинамика мицеллообразования. Квазихимическая модель и модель псевдофазного разделения в растворах ПАВ. Мицеллообразование в водных растворах смесей ПАВ. Влияние строения ПАВ на критическую концентрацию

мицеллообразования и состав смешанных мицелл (модели идеального и регулярного растворов).

2. Микроэмульсии как термодинамически устойчивые дисперсные системы. Условия получения. Классификация по Винзору. Фазовые диаграммы ПАВ-масло-вода (постоянная температура) и температура-концентрация ПАВ (постоянное соотношение масло:вода=1:1).

3. Закономерности адсорбции мицеллообразующих ПАВ на поверхности твёрдых тел из водных растворов ПАВ. Механизмы адсорбции неионогенных и ионогенных ПАВ на твёрдых поверхностях различной природы. Строение адсорбционных слоёв на твёрдой поверхности и методы их исследования.

4. Особенности протекания химических реакций в микроэмульсионных системах. Использование микроэмульсий для интенсификации реакций органического синтеза, ферментативных реакций, для получения наночастиц металлов, солей, полимерных латексов.

5. Смачивание. Вывод уравнения Юнга. Термодинамические условия смачивания, несмачивания, растекания. Гистерезис смачивания.

6. Эффект Ребиндера. Механизмы влияния среды на прочность и деформационные свойства твердых тел. Роль физико-химических взаимодействий на поверхности раздела твёрдое тело/жидкая фаза в процессах деформации и разрушения. Факторы, определяющие степень проявления эффекта.

7. Расклинивающее давление в тонких плёнках и его определение по Дерягину. Энергия взаимодействия плоских поверхностей, энергия и сила взаимодействия между сферическими частицами: приближение Дерягина.

8. Электростатическая составляющая расклинивающего давления по Дерягину и её роль в устойчивости дисперсных систем.

9. Агрегативная устойчивость термодинамически неустойчивых дисперсных систем. Основы теории ДЛФО. Структурно-механический барьер по Ребиндеру как сильный фактор устойчивости дисперсных систем.

10. Структурообразование в дисперсных системах. Типы контактов между частицами дисперсной фазы. Условия возникновения коагуляционных контактов в дисперсных системах. Влияние адсорбции ПАВ на свойства коагуляционных контактов. Механизмы образования фазовых контактов: пластическая деформация, кристаллизация, высокотемпературное и жидкофазное спекание.

5. Лазерная химия

1. Лазерный синтез и лазерное управление химическими реакциями, в том числе, инициирование реакций и селективное изменение их параметров, детектирование промежуточных и конечных продуктов. Лазерная фотохимия (разделение изотопов).

2. Характеристики лазерного излучения (когерентность, направленность, интенсивность, монохроматичность, поляризация). Взаимодействие молекул с лазерным излучением фемтосекундной длительности. Волновые пакеты и динамика молекулярных колебаний. Исследование механизма элементарного акта химических реакций.

3. Лазерный синтез молекулярного Бозе-Эйнштейн конденсата. Фото ассоциация ультрахолодных атомов. Лазерная спектроскопия и квантовохимические методы поиска эффективных путей лазерного охлаждения. Лазерное управление ультрахолодным молекулярным ансамблем.

4. Взаимодействие лазерного излучения с твердыми веществами. Лазерная абляция и лазерный синтез функциональных материалов. Лазерная обработка материалов. Синтез мелкодисперсных порошков и наноструктур.
5. Техника лазерного эксперимента. Лазерные источники излучения (непрерывные, импульсные). Преобразователи частоты лазерного излучения. Измерения энергетических, частотных, временных и пространственных характеристик излучения. Фотодетекторы, пироэлектрические приемники, оптоакустические преобразователи. Принципы построения лазерных экспериментальных установок.
6. Лазерный пробоотбор в аналитической практике. Образование лазерной плазмы и процессы, протекающие в ней. Спектры поглощения и испускания пробы при лазерной атомизации. Сочетание лазерного пробоотбора со спектроскопическими методами анализа. Сравнение с другими атомизаторами, используемыми в спектральном анализе.
7. Лазеры для селективного возбуждения атомов и молекул в спектральных методах анализа. Лазерно-индуцированная флуоресценция. Комбинационное рассеяние света. Лазерная атомно-абсорбционная и атомно-ионизационная спектроскопия. Метрологические характеристики спектральных методов анализа с лазерным возбуждением.
8. Лазерная химия адсорбированных молекул. Модификация поверхности лазерным излучением. Механизмы диссоциации молекул возбужденных многофотонным лазерным излучением. Внутримолекулярная динамика лазерного возбуждения и электронно-колебательной релаксации адсорбированных молекул.
9. Физико-химические принципы работы химических и эксимерных лазеров, а также лазеров на парах металлов. Роль лазерной спектроскопии и квантовохимического моделирования в оптимизации параметров газофазных лазерных сред.
10. Лазерное зондирование атмосферы. Астрономическая лазерная спектроскопия. «Искусственные» звезды и адаптивная оптика. Лазерная абляция космических объектов. Обнаружение и борьба с космическим «мусором» и астероидной опасностью.

6. Медицинская химия и тонкий органический синтез

1. Основные этапы конструирования лекарственных препаратов. Молекулярные мишени. Соединение-лидер и стратегии его поиска. Оценка качества соединения-лидера.
2. Основные типы взаимодействий лекарства с белком. Понятие о фармакофоре. Рациональные подходы к созданию лекарственных веществ, действующих как ингибиторы ферментов.
3. Понятие об агонистах и антагонистах рецепторных белков и общие подходы к созданию их структур.
4. Рациональные подходы к созданию структур лекарственных веществ, взаимодействующих с ДНК.
5. Изменение структуры разрабатываемого вещества с целью улучшения его биодоступности: изменение баланса «липофильность – гидрофильность» (в том числе для преодоления гематоэнцефалического барьера), «защита» от действия метаболических ферментов. Попытки предсказания возможности доведения активного соединения до лекарства.

6. Количественные характеристики биологической активности. Тестирование *in vivo* и *in vitro*. Терапевтический индекс. Примеры структур веществ, дающих «положительные» результаты тестирования за счет неспецифических взаимодействий с белками.
7. Комбинаторные библиотеки, принципы их формирования. Твердофазный и жидкофазный параллельный синтез – особенности, достоинства и недостатки. Примеры применения в медицинской химии.
8. Эмпирические правила биоизостерической замены в соединении-лидере. Классические и неклассические биоизостеры.
9. Метод ограничения конформационной подвижности молекулы соединения-лидера.
10. Пролекарства и биопредшественники. Группировки-носители в пролекарствах. Представление о «мягких» и «жестких» лекарствах.

7. Нанобиоматериалы и нанобиотехнологии

1. Молекулярные конвейеры, насосы и машины. Роль в метаболических процессах, принципы функционирования и перспективы использования в нанобиотехнологиях.
2. Представители основных классов биологически важных молекул как нанобиоматериалы. Особенности формирования ДНК-наноматериалов, белковых/пептидных наноматериалов, типы липидных надмолекулярных структур.
3. Обмен генетической информацией между микроорганизмами. 4. Теории ферментативного катализа. Типы связывания субстрата и фермента.
5. Регуляция ферментов (эффекторами, средой и температурой). Роль витаминов в ферментативном катализе. Примеры пар витамин - кофермент и катализируемых ферментом реакций.
6. Денатурация и инактивация ферментов. Принципы и методы стабилизации ферментов. Практическое использование ферментов (в химическом синтезе, анализе, медицине).
7. Особенности высокодисперсного состояния вещества. Размерные эффекты. Зависимость физических свойств частиц от их размера (можно проанализировать на примере квантовых точек или металлических плазмонных наночастиц, или магнитных частиц). Практическое применение наночастиц.
8. Наночастицы в качестве меток в иммунохимических методах анализа. Спектральные свойства наночастиц (можно рассмотреть на примере коллоидного золота и др.) и особенности их использования в качестве меток антител. Латеральный проточный иммуноанализ (иммунохроматографический анализ), примеры практического использования (тест-полоски).
9. Биоанализ и биосенсоры. Понятия рецептора, трансдьюсера и детектора применительно к биосенсору. Примеры биоаналитических систем. Классификация биосенсорных систем по принципам работы детектора.
10. Основные подходы к получению наноинкапсулированных лекарственных препаратов. Их преимущества и возможные ограничения. Поведение наночастиц в организме млекопитающих. Подходы, используемые для направленной доставки наноинкапсулированных лекарственных препаратов. Тераностика.

8. Неорганическая химия

1. Твердофазный синтез неорганических веществ, преимущества и недостатки, способы его активации. Гомогенизация методами «мягкой химии»: золь-гель процесс, криохимический метод, метод Печини. Механохимический подход и синтез при высоком давлении.
2. Методы выращивания монокристаллов неорганических веществ из расплава. Получение монокристаллов конгруэнтно и инконгруэнтно плавящихся соединений, методы Бриджмена, Чохральского, кристаллизация из раствора в расплаве. Принцип зонной очистки.
3. Синтез неорганических веществ и материалов из растворов. Основы сольво- и гидротермального синтеза. Синтез в сверхкритических условиях.
4. Получение веществ и материалов из газовой фазы: метод химического осаждения из пара, химические транспортные реакции. Термодинамические основы выбора транспортного агента.
5. Методы получения наноразмерных неорганических веществ различной размерности: 0D, 1D, 2D, теоретическое обоснование и практическая реализация. Золь-гель процесс, криохимический метод, распылительная сушка, синтез в сверхкритическом CO₂.
6. Подходы к теоретическому моделированию неорганических молекулярных и твердотельных соединений: основные положения метода Хартри-Фока и теории функционала плотности, их области применения. Различия в подходах к описанию ограниченных объектов и протяженных структур.
7. Неорганические координационные соединения (КС). Описание электронного строения комплексов методами ТКП и МО, связь электронного строения со свойствами.
8. Основы метода Гиллеспи и метода молекулярных орбиталей. Их применение для описания геометрии, электронного строения и химических свойств молекул.
9. На примере выбранной Вами группы периодической системы Д.И. Менделеева рассмотрите основные тенденции в изменении химических свойств p-элементов и их соединений.
10. На примере выбранной Вами группы периодической системы Д.И. Менделеева рассмотрите основные тенденции в изменении химических свойств d-элементов и их соединений.

9. Нефтехимия

1. Гомогенный и гетерогенный катализ – преимущества и недостатки
2. Гидроочистка и гидрокрекинг – сырье, катализаторы, условия проведения, получаемые продукты.
3. Метанол – получение и применение.
4. Каталитический крекинг – механизм, катализаторы, условия проведения, продукты.

5. Основные промышленные процессы получения низших олефинов – сырье, условия проведения, продукты.
6. Синтез-газ и процессы на его основе.
7. Процессы для улучшения качества моторных топлив – алкилирование, изомеризация, катализаторы и условия проведения.
8. Нефтехимические процессы на основе бензола.
9. Гетероатомные соединения газообразных и жидких горючих ископаемых, процессы их удаления.
10. Окислительные процессы в нефтехимии.

10. Органическая химия

1. Химические свойства насыщенных углеводородов (алканов). Свободнорадикальные и электрофильные реакции замещения. Свободнорадикальный цепной механизм: основные стадии и закономерности. Факторы, влияющие на стабильность свободных радикалов. Свободнорадикальные реакции замещения в ненасыщенных соединениях – аллильное и бензильное бромирование.
2. Алкены. Структура и реакционная способность двойной связи. Реакции присоединения. Механизм электрофильного присоединения и основные закономерности. Регио- и стереоселективность присоединения. Реакции гидрирования, гидроборирования, гидрогалогенирования и гидроксирования.
3. Диены с кумулированными, сопряженными и изолированными двойными связями – структура и особенности реакционной способности. Реакции сопряженных диенов. Понятие о кинетическом и термодинамическом контроле. Циклоприсоединение: реакция Дильса-Альдера.
4. Особенности химических свойств алкинов. Структура тройной связи. Сравнение реакционной способности алкинов и алкенов в реакциях электрофильного присоединения. СН-кислотность алкинов-1 и нуклеофильные реакции ацетиленид-анионов (нуклеофильное замещение с алкилгалогенидами и присоединение к карбонильной группе). Ацетилен-алленовая перегруппировка и ее использование для целенаправленного смещения тройной связи.
5. Классификация механизмов нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода (S_N1 - и S_N2 -механизмы). Основные характеристики бимолекулярного и мономолекулярного механизма. Зависимость механизма реакции от структурных факторов в исходном соединении. Понятие нуклеофильности и факторы, определяющие нуклеофильность. Роль растворителя (среды) в S_N1 - и S_N2 -процессах. Межфазный катализ в S_N2 -процессах. Методы создания хорошей уходящей группы.
6. Реакции β -элиминирования. Механизмы β -элиминирования. Правила Зайцева и Гофмана. Факторы определяющие направление элиминирования. Стереохимия $E2$ элиминирования. Конкуренция $E1$ и S_N1 реакций. Конкуренция $E2$ и S_N2 реакций. Факторы влияющие на эту конкуренцию. Использование $E1$ - и $E2$ -элиминирования в синтетической практике для получения алкенов, алкинов и диенов.
7. Активные металлоорганические соединения в органической химии. Методы синтеза литий- и магнийорганических соединений из галогенпроизводных и СН-

кислот. Медьорганические соединения: синтез диалкил- и диарилкупратов. Литий-, магнийорганические соединения и купраты в синтезе алканов, первичных, вторичных и третичных спиртов, кетонов, карбоновых кислот.

8. Карбонильные соединения. Электрофильность карбонильного углерода, влияние структуры и заместителей на реакционную способность карбонильной группы в альдегидах и кетонах. Нуклеофильное присоединение к карбонильной группе воды, спиртов и тиолов. Механизм, тетраэдрический интермедиат, кислотно-основной катализ. Защита карбонильной группы. 1,3-дителианы. Получение бисульфитных производных, циангидринов (оксинитрилов) и ацетиленовых спиртов. Взаимодействие карбонильных соединений с первичными и вторичными аминами. Оксимы, гидразоны, арилгидразоны
9. Енолизуемые карбонильные соединения. Кето-енольная таутомерия, влияние структуры карбонильного соединения на константу равновесия, кислотно-основной катализ таутомерного превращения. Енолы карбонильных соединений в реакциях галогенирования, изотопного обмена (дейтерирования) и рацемизации оптически-активных форм. Енолят-ионы, методы их генерирования в равновесных и кинетически-контролируемых условиях. Альдольная конденсация альдегидов и кетонов. Механизм реакции, кислотно-основной катализ. Направленная альдольная конденсация с использованием литиевых и кремниевых енолятов. Енамины и их использование в синтезе.
10. Ароматичность. Критерии ароматичности: теоретические (правило Хюккеля) и экспериментальные (структурный, магнитный, термодинамический). Строение бензола. Формула Кекуле. Современные представления о строении бензола. Другие ароматические соединения: аннулены, циклические ионы, конденсированные ароматические углеводороды, гетероциклы. Антиароматичность.

11. Радиохимия

1. Стабильность атомных ядер. Общая характеристика типов радиоактивного распада. Экзотические типы радиоактивного распада.
2. Теоретические основы использования ядерных реакций для получения радионуклидов.
3. Методы выделения радионуклидов из облученных мишеней.
4. Радиометрия и спектроскопия ионизирующих излучений. Основные типы детекторов.
5. Дозиметрия ионизирующих излучений. Нормы радиационной безопасности. Правила работы с источниками ионизирующих излучений и радиоактивными веществами.
6. Радионуклиды в окружающей среде. Фоновое облучение населения.
7. Общие принципы использования радионуклидов в ядерной медицине.
8. Ядерно-топливный цикл. Получение топлива для ядерных реакторов. Обращение с отработанным ядерным топливом.
9. Общие принципы получения меченых соединений.
10. Метод радиоактивных индикаторов.

12. Физическая химия

1. Термодинамические потенциалы и их применение при изучении процессов и равновесных состояний систем (на примере какого-либо одного по выбору учащегося).
2. Химическое равновесие: константа равновесия, расчет равновесного состава систем различного типа (по выбору учащегося: гомогенные, гетерогенные, газовые или конденсированные).
3. Фазовые равновесия: способы расчета и экспериментальные исследования на примере системы любой компонентности. Использование фазовых диаграмм при решении практических задач.
4. Феноменологическая кинетика сложных реакций: общие принципы составления кинетических схем и определения их параметров (на примере одного типа реакций по выбору учащегося). Квазистационарное приближение и условия его применимости.
5. Теории химической кинетики, сравнение их возможностей для описания реакций различного типа (разной молекулярности, в газовой и конденсированной фазе).
6. Общие особенности гомогенного катализа. Основные кинетические схемы и соответствующие кинетические уравнения, определение их параметров из экспериментальных данных. Примеры каталитических процессов.
7. Общие особенности гетерогенного катализа. Основные кинетические схемы и соответствующие кинетические уравнения, определение их параметров из экспериментальных данных. Примеры каталитических процессов.
8. Электронные состояния молекулярных систем: основные модельные приближения, используемые при их описании, физическая интерпретация результатов и их предсказательная сила (на примере решения какой-либо физико-химической проблемы по выбору учащегося).
9. Ядерные (колебательно-вращательные) состояния молекулярных систем: основные модельные приближения, используемые при их описании, физическая интерпретация результатов и их предсказательная сила (на примере решения какой-либо физико-химической проблемы по выбору учащегося).
10. Квантово-механические модели молекул как основа статистико-термодинамического описания химических превращений и равновесных состояний закрытых газофазных систем

13. Фундаментальная и прикладная энзимология

1. Принципиальные особенности ферментов как катализаторов в сравнении с другими катализаторами. Сорбция субстрата на ферменте. Природа и энергия образующихся связей. Использование энергии сорбции для ускорения ферментативной реакции.
2. Уравнение Михаэлиса-Ментен. Методы определения кинетических параметров из экспериментальных данных. Стационарная кинетика ферментативных реакций. Скорость-лимитирующая стадия. Наблюдаемые кинетические параметры, их физический смысл и приемы анализа (вклад констант элементарных стадий).
3. Принципы и механизмы регуляции ферментативной активности в метаболических процессах. Отличие регуляции линейных цепочек превращений и циклических

процессов.

4. Химические механизмы ускорения реакций в ферментативном катализе. Системы с переносом заряда в активных центрах ферментов, например, Ser-His-Asp или CysHis и др. Какова роль таких систем в катализе ферментами?
5. Роль ионов металлов в структуре и катализе ферментами (могут быть разные примеры в разных билетах: цинк в карбоксипептидазе, карбоангидразе, алкогольдегидрогеназе; железо, кальций в пероксидазе и т.д.).
6. Роль витаминов в ферментативном катализе. Кофакторы (коферменты). Механизмы их участия в ферментативных реакциях. Примеры пар витамин – кофактор (кофермент) и катализируемых ферментом реакций.
7. ДНК, хромосомы и плазмиды. Строение, репликация, сохранение в ряду поколений.
8. Экспрессии генов и ее регуляция. Преимущества генно-инженерных методов получения белков и ферментов по сравнению с традиционными.
9. Клеточная и субклеточная организация прокариот. Прокариоты в промышленных технологиях.
10. Методы иммунохимического анализа. Иммуноферментный анализ (ИФА). Ферменты для ИФА. Сравнительные характеристики гетерогенных и гомогенных методов ИФА.

14. Химическая кинетика

1. Методы описания многостадийных химических реакций.
2. Цепные и цепные разветвленные химические реакции. Механизмы зарождения и обрыва цепей. Механизмы разветвления. Пределы воспламенения.
3. Диффузионно-контролируемые химические реакции. Стационарный и нестационарный режимы. Диффузионные ограничения в гомогенных и гетерогенных реакциях.
4. Поверхности потенциальной энергии. Теория переходного состояния (активированного комплекса), область применения и ограничения этой модели.
5. Квантовые эффекты в химии. Туннельный эффект. Критерии туннельного протекания реакции. Магнитные и спиновые явления.
6. Основные принципы катализа. Типы каталитических систем и особенности их кинетического описания.
7. Кинетика фотохимических превращений и методы ее исследования.
8. Особенности кинетики протекания химических реакций в жидкой и твердой фазе.
9. Адиабатическое и неадиабатическое протекание химических реакций. Теоретические модели, применимые для оценки вероятности (константы скорости) протекания таких реакций.
10. Возможности квантовой химии для расчета и предсказания кинетических характеристик элементарных и многостадийных реакций.

15. Химия высоких энергий

1. Определение химии высоких энергий (термодинамические и кинетические критерии).

2. Радиационно-химический выход и квантовый выход.
3. Пространственная неоднородность радиационно-химических процессов.
4. Временная шкала радиационно-химических и фотохимических процессов.
5. Первичные интермедиаты радиационно-химических процессов.
6. Сольватированный электрон (образование, спектроскопические проявления и реакции).
7. Радиолиз воды и разбавленных водных растворов.
8. Радиолиз углеводов.
9. Радиационная стойкость и радиационная чувствительность полимеров.
10. Технологии радиационного модифицирования полимеров.

16. Химия и технология веществ и материалов

1. Получение синтез-газа. Основные продукты переработки природного газа.
2. Основные крупнотоннажные химические производства и их продукты (на примере серной и азотной кислот, аммиака, карбамида и минеральных удобрений).
3. Пути переработки нефти. Производство топлива и основных продуктов нефтехимии.
4. Полимерные композиционные материалы. Армирующие и связующие компоненты. Методы получения и применение.
5. Основные методы получения и области применения углеродных материалов.
6. Квалифицированная и неквалифицированная энергия. Эффективность обратимых и необратимых энергопреобразующих устройств.
7. Критерии эффективности химико-технологической системы. Эксергия, уравнение баланса эксергии.
8. Интенсивность перемешивания в реакционном объеме, продольная дисперсия. Проблема масштабного перехода в химической технологии.
9. Негативное воздействие химико-технологических систем на окружающую среду. Стохастические и постоянно действующие факторы.
10. Методы управления техногенным и экологическим риском.

17. Химия ионных и молекулярных систем

1. Применение метода ЯМР для идентификации и исследования строения химических веществ, изучения динамики молекул и ионов.
2. Масс-спектрометрия: Основы и возможности метода.
3. Методы современной микроскопии. Сопоставление различных подходов. Возможности химического анализа (*EDX*).
4. Методы исследования кристаллической структуры химических веществ. Сопоставление различных подходов.

5. Гетерогенный катализ. Механизмы каталитических процессов и изменение энергии активации при переходе к каталитическим процессам.
6. Строение и энергия поверхности кристаллов. Влияние размера частиц на свойства химических соединений.
7. Методы активации химических реакций для веществ в различных фазовых состояниях.
8. Основные типы активных промежуточных частиц в химических реакциях. Методы их обнаружения и способы генерации.
9. Колебательная спектроскопия: методы и возможности. Исследование строения веществ.
10. Методы газовой и жидкостной хроматографии.

18. Химия твердого тела

1. Классификация дефектов по размерности. Точечные дефекты. Виды точечных дефектов: вакансии, примесные дефекты. Дефекты по Шоттки и Френкелю. Реакции образования дефектов и их константы. Способы создания неравновесных концентраций точечных дефектов. Влияние точечных дефектов на свойства кристаллических веществ.
2. Твердые растворы. Типы твердых растворов: замещения, внедрения, вычитания. Основные факторы, определяющие существование твердых растворов замещения. Размерный фактор. Электрохимический фактор. Электронная концентрация e/a .
3. Полиморфизм; примеры и причины полиморфных превращений. Физико-химические методы, позволяющие изучать полиморфные превращения и различать полиморфные модификации.
4. Важнейшие семейства ИМС: фазы Юм-Розери, фазы Лавеса, фазы σ -семейства. Роль размерного и электронного фактора в образовании ИМС указанных типов.
5. Интерметаллические соединения тройных систем РЗМ-ПМ-Э (ПМ – платиновые металлы, Э – р-элементы 13 и 14 групп ПС), их кристаллическая структура и физические свойства: флуктуация валентности атомов РЗМ, тяжелофермионное состояние, сверхпроводимость II рода, эффект Кондо.
6. Сканирующая электронная микроскопия. Принцип получения изображения. Виды излучения, образующиеся при взаимодействии электронного зонда с образцом. Вторичные электроны. Обратные рассеянные (отраженные) электроны. Характеристическое рентгеновское излучение.
7. Микрорентгеноспектральный анализ. Характеристическое рентгеновское излучение. Стандарты для микроанализа. Расчет концентрации элементов в образце. Поправка на поглощение. Поправка на атомный номер элемента. Поправка на флуоресценцию. Факторы, влияющие на точность количественного анализа: состояние поверхности и пористость, микронеоднородность, наложение пиков.
8. Базовые принципы и области применения рентгенофазового анализа. Процедуры обнаружения и идентификации новых кристаллических фаз в многофазных образцах.

9. Закономерности коррозионных процессов в кислых, нейтральных и щелочных средах. Питтинговая коррозия. Межкристаллитная, щелевая и другие виды локальной коррозии металлов и сплавов.
10. Пассивное состояние металлов. Кинетика и механизм формирования пассивирующих пленок на поверхности металлов. Методы защиты от коррозии, использующие различные покрытия. Катодная и анодная защита от коррозии

19. Электрохимия

1. Ион-ионные взаимодействия в растворах электролитов.
2. Явление сольватации.
3. Скачок потенциала на границе двух растворов.
4. Строение заряженной межфазной границы для идеально поляризуемых электродов.
5. Адсорбция с переносом заряда.
6. Кинетика электродного процесса в условиях медленной стационарной диффузии.
7. Кинетика стадии переноса электрона на заряженной межфазной границе.
8. Электрохимическая интеркаляция.
9. Электrokристаллизация.
10. Анодное растворение и пассивация металлов.