

## 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 на примере радикальной и живой анионной полимеризации (типы мономеров и инициаторов, элементарные реакции, зависимость скорости и степени полимеризации от концентрации мономера, инициатора, температуры и полярности растворителя).
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. Тэта-растворитель и Тэта-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. Смачивание. Вывод уравнения Юнга. Термодинамические условия смачивания, несмачивания, растекания. Гистерезис смачивания. Управление смачиванием при помощи ПАВ. Определение удельной поверхностной энергии низкоэнергетических поверхностей твердых тел методом смачивания.

2. Мицеллообразование в водных растворах ПАВ. Квазихимическая модель и модель псевдофазного разделения. Термодинамика мицеллообразования. Мицеллообразование в водных растворах бинарных смесей ПАВ мицелл (модели идеального и регулярного растворов).
3. Солюбилизация в водных растворах ПАВ. Солюбилизационная емкость мицелл ПАВ и ее экспериментальное определение. Локализация солюбилизаторов различной природы в мицеллах ПАВ. Термодинамика солюбилизации. Практическое применение солюбилизации.
4. Микроэмульсии как термодинамически устойчивые дисперсные системы. Условия получения. Классификация по Винзору. Фазовые диаграммы для микроэмульсионных систем. Экспериментальные методы исследования микроэмульсий.
5. Конденсационные методы получения дисперсных систем. Теории гомогенного и гетерогенного зародышеобразования. Кинетика зародышеобразования. Методы регулирования размеров частиц.
6. Получение наночастиц различной природы. Обратные микроэмульсии как матрица для получения наночастиц. Получение наночастиц на основе золь-гель перехода.
7. Роль дисперсионных взаимодействий в дисперсных системах. Энергия и сила дисперсионных взаимодействий между двумя макрофазами, разделенными тонкой плоской прослойкой (вакуум или жидкость). Энергия и сила взаимодействия двух сферических частиц (в вакууме и в дисперсионной среде).
8. Агрегативная устойчивость дисперсных систем. Расклинивающее давление по Дерягину. Основы теории ДЛФО. Составляющие расклинивающего давления различной природы. Структурно-механический барьер по Ребиндеру как сильный фактор устойчивости дисперсных систем.
9. 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.
10. 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.

## 5. Лазерная химия

1. Характеристики лазерного излучения (когерентность, направленность, интенсивность, монохроматичность, поляризация, частота, длительность, модовая структура). Понятие резонатора и основные его элементы.
2. Наиболее распространенные непрерывные и импульсные лазеры – примеры. Преобразователи частоты лазерного излучения. Методы измерения характеристик лазерного излучения. Особенности лазерного излучения фемтосекундной длительности.
3. Физико-химические принципы работы химических и эксимерных лазеров, а также лазеров на парах металлов, твердотельных лазеров, лазеров на красителях: схемы накачки, примеры.
4. Лазерная абляция и лазерно-индуцированная десорбция. Сочетание лазерного пробоя со спектроскопическими методами анализа. Сравнение с другими способами атомизации, используемыми в спектральном анализе.
5. Лазерный синтез ультрахолодных молекулярных ансамблей. Фото ассоциация и магнитоассоциация ультрахолодных атомов. Роль прецизионной лазерной

спектроскопии и квантовохимического моделирования в поиске наиболее эффективных путей лазерной «сборки» и охлаждения молекул.

6. Лазерно-индуцированная флуоресценция. Насыщение перехода. Одно- и двухступенчатые схемы возбуждения. Примеры определения спектроскопических констант и концентрации атомов и молекул.
7. Лазерно-искровая эмиссионная спектрометрия: основы метода, аппаратура. Основные факторы, влияющие на измерения. Преимущества и недостатки метода. Примеры использования ЛИЭС и их метрологические характеристики.
8. Лазерно-индуцированная ионизация. Оптогальванический эффект. Резонансно-ионизационная спектроскопия. Многофотонная ионизация. Атомно-ионизационный метод. Примеры определения единичных атомов.
9. Комбинационное рассеяние света. Гигантское комбинационное рассеяние. Понятие плазмонного резонанса. Виды рассеяния света, мешающие факторы. Примеры использования КР и их метрологические характеристики.
10. Лазерное зондирование атмосферы. «Искусственные» звезды и адаптивная оптика. Особенности спектрального анализа астрономических объектов. Определение химического состава атмосферы экзопланет.

## **6. Медицинская химия и тонкий органический синтез**

1. Основные этапы конструирования лекарственных препаратов. Молекулярные мишени. Соединение-лидер и стратегии его поиска. Понятие о фармакофоре. Дизайн de novo.
2. Рациональные подходы к созданию структур лекарственных веществ, взаимодействующих с ДНК. Механизм противоопухолевого действия цисплатина и его аналогов. Примеры других подходов к конструированию металлосодержащих лекарственных препаратов.
3. Оптимизация соединения-лидера. Методология QSAR. Количественные характеристики биологической активности. Понятие о дескрипторах структуры. Общие представления о молекулярном моделировании.
4. Изменение структуры разрабатываемого вещества с целью улучшения его биодоступности: изменение баланса «липофильность – гидрофильность», «защита» от действия метаболических ферментов. Примеры структур веществ, дающих ложные «положительные» результаты тестирования.
5. Комбинаторные библиотеки, принципы их формирования. Твердофазный и жидкофазный параллельный синтез – особенности, достоинства и недостатки. Примеры органических реакций, используемых при создании комбинаторных библиотек.
6. Эмпирические правила биоизостерической замены в соединении-лидере. Классические и неклассические биоизостеры. Пример подхода к синтезу биоизостера соединения-лидера.
7. Метод ограничения конформационной подвижности молекулы соединения-лидера. Пример подхода к синтезу конформационно ограниченного аналога соединения-лидера.
8. Пролекарства и биопредшественники. Группировки-носители в пролекарствах. Представление о «мягких» и «жестких» лекарствах.
9. Планирование многостадийного синтеза: линейная и конвергентная схемы. Синтоны «логичные» и «нелогичные». Ретроны частичные и полные. Пример (в

общих чертах) реализации линейной и конвергентной стратегии синтеза лекарственного препарата.

10. Типы классификации и примеры структур лекарственных веществ, в состав молекул которых входят гетероатомы. Основные подходы к синтезу физиологически активных производных пиридина и индола.

## 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. Для одного типа наночастиц (например, квантовых точек, металлических плазмонных наночастиц, или магнитных частиц, или свой пример) проанализировать зависимость физических свойств частиц от их размера, а также разобрать основные сферы практических применений таких 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. Оптические методы исследования структурных свойств белков (спектрофотометрия в видимой и УФ-областях, флуоресцентные методы, ИК-спектроскопия, КД-спектроскопия и др.). Сравните кратко возможности и области применения методов.
10. Основные подходы к получению наноинкапсулированных лекарственных препаратов. Их преимущества и возможные ограничения. 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 CO<sub>2</sub>.
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. Каталитическая переработка альтернативного и возобновляемого биосырья в моторные топлива и сырье для нефтехимии.
3. Метанол – получение и применение
4. Каталитический крекинг – механизм, катализаторы, условия проведения, сырье и продукты.
5. Основные промышленные процессы получения низших олефинов – сырье, условия проведения. Продукты.
6. Синтез – газ и процессы на его основе.
7. Процессы улучшения качества моторных топлив – алкилирование, изомеризация. Катализаторы и условия проведения
8. Нефтехимические процессы на основе бензола.
9. Гидроочистка и гидрокрекинг – сырье катализаторы. Условия проведения. Получаемые продукты.
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  $\beta$ -элиминирования. Механизмы  $\beta$ -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.
2. Химическое равновесие. Стандартное состояние веществ, константы равновесия химических реакций в газовой и конденсированной фазах.
3. Фазовые равновесия: способы расчета и экспериментальные исследования на примере системы любой компонентности. Использование фазовых диаграмм при решении практических задач.
4. Монослойная адсорбция Ленгмюра и ферментативная кинетика Михаэлиса-Ментен: формальное сходство основных уравнений.
5. Взаимосвязи наблюдаемых кинетических параметров и величин, получаемых из теорий химической кинетики и квантовохимических расчётов.
6. Экспериментальные методы определения кинетических параметров сложных реакций. Учёт процессов массопереноса
7. Гетерогенный катализ: основные кинетические схемы, лимитирующие стадии, определение кинетических параметров из экспериментальных данных. Примеры каталитических процессов.

8. Поверхность потенциальной энергии: построение квантовохимическими методами и сопоставление рассчитанных характеристик с наблюдаемыми величинами.
9. Электронные состояния молекулярных систем. Экспериментальные и теоретические методы описания возбужденных состояний. Фотохимические реакции.
10. Колебательная и вращательная задачи в молекулярной спектроскопии. Основные физические модели, используемые для их решения.

### **13. Фундаментальная и прикладная энзимология**

- 1.1. 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. Понятия кооперативности, аллостерической регуляции. 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 Cys-His и др. Какова роль таких систем в катализе ферментами?
5. Роль ионов металлов в структуре и катализе ферментами (могут быть разные примеры: 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. Экспрессия 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 (например, пищевых).
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. Пути переработки нефти. Основные продукты нефтехимии и их производство.
3. Полимерные композиционные материалы. Армирующие и связующие компоненты.
4. Методы получения и применение полимерных композиционных материалов на основе стеклянных, базальтовых и углеродных волокон.
5. Основные методы получения и области применения алмаза и графита.

6. Основные методы получения и области применения графена и мультиграфеновых материалов.
7. Критерии эффективности химико-технологической системы. Основные принципы "зеленой химии".
8. Квалифицированная и неквалифицированная энергия. Эффективность обратимых и необратимых энергопреобразующих устройств.
9. Воздействие химико-технологических систем на окружающую среду. Случайные и постояннодействующие факторы.
10. Методы управления рисками на химическом производстве.

## 17. Химия ионных и молекулярных систем

1. Представление о молекулярных орбиталях в ионных и молекулярных системах.
2. Определение строения ионных и молекулярных систем спектральными методами.
3. Ретросинтетический анализ в органической химии.
4. Кислотность и основность неорганических и органических веществ.
5. Основные типы активных промежуточных частиц в химических реакциях. Методы их обнаружения и способы генерации.
6. Гомогенный и гетерогенный катализ. Механизмы каталитических процессов.
7. Строение ионных и молекулярных систем. Кристаллография.
8. Строение, получение и свойства основных классов металлоорганических соединений.
9. Химическое равновесие и кинетика химических реакций.
10. Общие представления о высокомолекулярных соединениях.

## 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. Важнейшие семейства ИМС: фазы Юм-Розери, фазы Лавеса, фазы  $\sigma$ -семейства. Роль размерного и электронного фактора в образовании ИМС указанных типов.

4. Интерметаллические соединения тройных систем РЗМ-ПМ-Э (ПМ – платиновые металлы, Э –  $d$ -элементы 13 и 14 групп ПС), их кристаллическая структура и физические свойства: флуктуация валентности атомов РЗМ, тяжелофермионное состояние, сверхпроводимость II рода, эффект Кондо.

5. Сканирующая электронная микроскопия. Принцип получения изображения. Виды излучения, образующиеся при взаимодействии электронного зонда с образцом. Микрорентгеноспектральный анализ. Характеристическое рентгеновское излучение. Стандарты для микроанализа. Факторы, влияющие на точность количественного анализа: состояние поверхности и пористость, микронеоднородность, наложение пиков

6. Базовые принципы и области применения рентгенофазового анализа. Процедуры обнаружения и идентификации новых кристаллических фаз в многофазных

образцах. Рентгеноструктурный анализ по порошку и монокристаллу: сходства и различия в порядке проведения дифракционного эксперимента.

7. Адсорбент, адсорбат. Виды адсорбции. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Ленгмюра. Основные положения теории Брунауэра – Эммета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента. Хроматография, различные её типы (газовая, жидкостная и др.).

8. Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и в электрохимической цепи. Термодинамика гальванического элемента. Электродвижущая сила, ее выражение через энергию Гиббса реакции в элементе. Уравнения Нернста и Гиббса – Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи. Понятие электродного потенциала.

9. Электрокатализ и его сущность. Электроды-катализаторы. Механизмы электрокаталитических превращений. Явление перенапряжения и эмпирическая формула Тафеля. Тафелевские наклоны.

10. Гетерогенный катализ. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Удельная и атомная активность. Селективность катализаторов. Роль адсорбции в кинетике гетерогенных каталитических реакций. Неоднородность поверхности катализаторов, нанесенные катализаторы. Энергия активации гетерогенных каталитических реакций. Основные промышленные каталитические процессы.

## 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. Электрокристаллизация.
10. Анодное растворение и пассивация металлов.