

УТВЕРЖДАЮ
Первый проректор, проректор по УР

_____ А.Е. Рудин

«16»01 2024 года

ПРОГРАММА ИТОГОВОЙ АТТЕСТАЦИИ

3.1 Итоговая аттестация

Учебный план: 1.4.4. ТПХ 2024 ОО 2024-2025 уч.год.plx

Кафедра: **44** Теоретической и прикладной химии

Научная специальность: 1.4.4. Физическая химия

Уровень образования: аспирантура

Форма обучения: очная

План учебного процесса

Семестр (курс для ЗАО)	Сам. работа	Контроль, час.	Трудоёмкость, ЗЕТ	Форма промежуточной аттестации
8	УП	216	6	Экзамен
	РПД	216	6	
Итого	УП	216	6	
	РПД	216	6	

Санкт-Петербург
2024

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии приказом Минобрнауки России от 20.10.2021 № 951 "Об утверждении федеральных государственных требований к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), условиям их реализации, срокам освоения этих программ с учетом различных форм обучения, образовательных технологий и особенностей отдельных категорий аспирантов (адъюнктов)"

Составитель (и):

Заведующий кафедрой

Новоселов
Петрович

Николай

От кафедры составителя:

Заведующий кафедрой теоретической и прикладной химии

Новоселов Н.П.

От выпускающей кафедры:

Заведующий кафедрой

Новоселов Николай
Петрович

Методический отдел:

1 ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

1.1 Цель итоговой аттестации: Определить соответствие результатов освоения выпускником программы аспирантуры федеральным государственным требованиям к подготовке кадров высшей квалификации и подтвердить способность и готовность выпускника использовать знания, умения и (или) практический опыт в научной и научно-педагогической деятельности

1.2 Задачи итоговой аттестации:

- Оценить владение аспиранта теоретическими знаниями и практическими навыками в области эффективного функционирования и совершенствования производственных процессов, научно-организационных и практических методов и средств решения проблем организации производства (текстильной и легкой промышленности), готовности их применения при решении профессиональных и научно-исследовательских, педагогических задач;

- определить (выявить) уровень подготовленности аспиранта к самостоятельному использованию знаний по организации производства (текстильной и легкой промышленности) на основе широкого применения новых информационных технологий.

2 ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Знать: Современное состояние исследований в области химической термодинамики растворов, фазовых равновесий и характер межчастичных взаимодействий. Методы математического планирования экспериментальных исследований применительно к изучаемым системам. Конкретные методы исследования систем применительно к их свойствам. Современное состояние по выбранному научному направлению применительно к изучению физико-химических свойств систем. Современные методы исследований в области физической химии. Принципы научной экспертизы, требования к проведению научной экспертизы. Об объектах, предмете и методах исследования, лабораторной и инструментальной базе, о подходах к решению исследовательских задач. Навыки организации проведения исследований в области физической химии. Требования к защите интеллектуальной собственности. Критерии оценки результативности научных исследований и проектов. Научную терминологию в области химических наук. Требования охраны труда в осваиваемой ассистентами-стажерами области профессиональной деятельности.

Уметь: Рассчитывать термодинамические потенциалы, межчастичных взаимодействий, характер образования координационной и сольватной сферы в растворах. Ставить цели и задачи исследований. Проводить поиск литературы по теме исследования, в том числе на иностранном языке. Использовать методы математического планирования и оценки погрешностей применительно к используемым экспериментальным методам. Измерять физико-химические свойства систем в зависимости от поставленной научной задачи. Проводить комплексные исследования свойств различных химических соединений. Умение оформлять документацию. Принимать решения.

Применить достижения науки в совершенствовании исследований химических объектов. Проводить исследования, осуществлять необходимые расчеты, обрабатывать полученные результаты, моделировать исследуемые объекты, принимать решения. Формулировать научную проблему, проводить обзор и сравнение методов ее решения. Делать обоснованные выводы. Оценивать проделанную работу и давать рекомендации по ее совершенствованию.

Владеть: Навыками проработки литературы по заданной теме. Навыками составления презентаций и опытом выступления на конференциях, в том числе с международным участием. Навыками обработки и интерпретации информации в области исследования. Статистико-математическими навыками для оценки результатов эксперимента. Навыками организации проведения исследований в области физической химии с использованием новых методов. Навыками анализа и оценки методов использования. Достигать и документировать запланированный результат взаимодействия. Навыками использования современных инструментальных методов, позволяющих реализовывать результаты исследований, организовывать составление отчетов в установленном порядке. Навыками обработки и интерпретации полученных данных.

3. СИСТЕМА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ

Шкала оценивания	Критерии оценивания
	Устное собеседование
5 (отлично)	Ставится в том случае, если содержание научного доклада соответствует содержанию научно-квалификационной работы (диссертации), аспирант качественно структурировал теоретический и иллюстративный материалы научного доклада. В докладе аспирант продемонстрировал высокую степень владения содержанием научного доклада. Изложенные теоретические положения иллюстрируются примерами из практики профессиональной подготовки. В ответе предлагается и обосновывается собственная точка зрения на рассматриваемую проблему. В целом ответ раскрывает суть поставленного вопроса, демонстрирует глубокое системное владение учебным материалом. Содержание научного доклада излагается грамотным профессиональным языком с осознанным применением научной терминологии.

4 (хорошо)	Ставится в том случае, если содержание научного доклада в основном соответствует содержанию научно-квалификационной работы (диссертации), аспирант структурировал теоретический и иллюстративный материалы научного доклада с незначительными замечаниями. В докладе аспирант продемонстрировал владение содержанием научного доклада. При этом отдельные теоретические положения иллюстрируются примерами из практики профессиональной подготовки. В ответе предлагается собственная точка зрения на рассматриваемые проблемы. В целом раскрывает суть проблемы, демонстрирует владение материалом обсуждения. Содержание научного доклада излагается грамотным профессиональным языком с применением соответствующей научной терминологии.
3 (удовлетворительно)	Ставится в том случае, если содержание научного доклада частично соответствует содержанию научно-квалификационной работы (диссертации), аспирант слабо структурировал теоретический и иллюстративный материалы научного доклада. В докладе аспирант продемонстрировал слабое владение содержанием научного доклада. При этом отдельные теоретические положения иллюстрируются примерами из практики профессиональной подготовки. В ответе отсутствует собственная точка зрения на рассматриваемые проблемы. В целом ответ раскрывает суть проблемы, однако демонстрирует отсутствие системного подхода к её решению. Содержание ответа недостаточно аргументировано, излагается профессиональным языком с не всегда точным применением соответствующей научной терминологии
2 (неудовлетворительно)	Ставится в том случае, если содержание научного доклада не соответствует содержанию научно-квалификационной работы (диссертации), аспирантом не структурированы теоретический и иллюстративный материалы научного доклада. При докладе аспирант не владеет содержанием научного доклада, что отражает не освоение порогового уровня оцениваемых компетенций. В научном докладе бессистемно и непоследовательно описываются общие представления о рассматриваемых проблемах, теоретические положения не иллюстрируются примерами из практики профессиональной подготовки. В ответе отсутствует собственная точка зрения на рассматриваемые проблемы. В целом ответ не раскрывает суть поставленной проблемы, демонстрирует отсутствие владения материалом научного доклада. Содержание ответов на вопросы содержит грубые ошибки в аргументации, имеются серьезные затруднения с использованием соответствующей научной терминологии. Также оценка «НЕУДОВЛЕТВОРИТЕЛЬНО» ставится в том случае, если аспирант отказался от представления научного доклада

3.1 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

3.2. Перечень контрольных вопросов

№ п/п	Формулировки вопросов
1)	Основные положения классической теории химического строения. Связь строения и свойств молекул.
2)	Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Уравнение Шредингера для свободной молекулы. Электронное волновое уравнение.
3)	Распределение электронной плотности в молекулах. Приделы применимости одноэлектронного приближения
4)	Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий. Кластеры атомов и молекул. Супермолекулы и супрамолекулярная химия
5)	Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей. Структура границы раздела конденсируемых фаз. Структура адсорбционных слоев.
6)	Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия и теплоемкость. Стандартное состояние и стандартные теплоты химических реакций. Зависимость теплового эффекта химической реакции от
7)	Энтропия и ее изменение в обратимых и необратимых процессах. Различные шкалы температур
8)	Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гемгольца. Уравнение Максвелла. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов
9)	Уравнение Гиббса-Гемгольца. Работа и теплота химического тпроцесса. Химические потенциалы
10)	Способы выражения составов растворов. Идеальные растворы. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активности. Коэффициенты активности и их определение

11)	Парциальные и молярные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса-Дюгема.
12)	Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Равновесие жидкость – пар в двухкомпонентных системах. Закон Гиббса-Коновалова. Азиатропные смеси
13)	Основные понятия химической кинетики. Простые и сложные реакции, молекулярность и скорость простой реакции. Способы определения скорости реакции. Кинетические уравнения. Константа
14)	Цепные реакции. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций. Кинетические особенности разветвленных цепных реакций. Тепловой взрыв
15)	Зависимость скорости химической реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы ее определения
16)	Различные типы химических реакций. Мономолекулярные реакции в газах. Бимолекулярные и тримолекулярные реакции
17)	Электрохимические реакции. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя
18)	Классификация каталитических реакций и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия
19)	Теория Дебая-Хюккеля и ее современное развитие. Предельные законы. Термодинамика ионной сольватации. Изменение структуры жидкости в близи ионов
20)	Термодинамика растворов: функции смешения и избыточные функции. Решеточные теории растворов. Регулярные и атермальные растворы. Жидкие кристаллы

4. Подготовка к итоговой аттестации

4.1. Требования к научно-квалификационной работе, научному докладу об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации) и порядку их выполнения

1.2. Требования к содержанию, объему и структуре итоговой аттестации

Итоговая аттестация обучающегося представляется в виде специально подготовленной рукописи, в которой содержится решение задачи, имеющей существенное значение для соответствующей отрасли знаний, либо изложены научно обоснованные технические, технологические или иные решения и разработки, имеющие существенное значение для развития науки. В НКР, имеющей прикладной характер, должны приводиться сведения о практическом использовании полученных автором научных результатов, а в НКР, имеющей теоретический характер, – рекомендации по использованию научных выводов.

НКР имеет следующую структуру:

- титульный лист по установленной форме,
- оглавление;
- текст НКР, включающий в себя введение, основную часть, заключение;

Введение к НКР включает в себя актуальность избранной темы, степень ее разработанности, цели и задачи, научную новизну, теоретическую и практическую значимость работы, методологию и методы научного исследования, положения, выносимые на защиту, степень достоверности и апробацию результатов.

В основной части текст НКР подразделяется на главы и параграфы или разделы и подразделы, которые нумеруются арабскими цифрами.

В заключении НКР излагаются итоги выполненного исследования, рекомендации, перспективы дальнейшей разработки темы. Текст НКР также может включать список сокращений и условных обозначений, словарь терминов, список иллюстративного материала, приложения.

- список литературы.

4.1.3 Требования к содержанию, объему и структуре научного доклада об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации)

По основным результатам подготовленной НКР готовится научный доклад объемом до 1 авторского листа. По НКР в области гуманитарных наук объем научного доклада может составлять до 1,5 авторского листа.

В тексте научного доклада излагаются основные идеи, теоретические обобщения и основные результаты, полученные обучающимся в процессе исследовательской работы, представленные в НКР и опубликованные в рецензируемых научных изданиях, показываются вклад автора в проведенное исследование, степень новизны и практическая значимость приведенных результатов исследований, результат их внедрения в науку и практику.

Научный доклад имеет следующую структуру:

- титульный лист по установленной форме,
- общая характеристика работы, где необходимо отразить: актуальность темы, цель и задачи работы, объект и предмет исследования, теоретическую и методологическую основы исследования, материалы исследования, обоснованность и достоверность результатов исследования, научную новизну работы, теоретическую и практическую значимость исследования, структуру работы;
- основные положения, выносимые на защиту;
- выводы и рекомендации;
- основные научные публикации по теме НКР и апробацию работы.

4.2. Правила оформления научно-квалификационной работы и научного доклада об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации)

Научно-квалификационная работа и научный доклад об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы должны соответствовать правилам, изложенным в ГОСТ 7.0.11-2011 Система стандартов по информации, библиотечному и издательскому делу. Диссертация и автореферат диссертации. Структура и правила оформления.

4.3. Порядок выполнения научно-квалификационной работы, научного доклада об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации) и подготовки текста научного доклада для размещения в ЭБС

Выпускная квалификационная работа выполняется на основе результатов научно-исследовательской работы - самостоятельно выполняемого исследования по подготовке диссертации. Выпускная научная работа представляется в форме НАУЧНОГО ДОКЛАДА по теме будущей диссертации по утверждённой теме в соответствии с приказом ректора. Защита выпускной квалификационной работы не заменяет защиту кандидатской диссертации согласно Положению о присуждении учёных степеней. Выпускная квалификационная работа в форме научного доклада содержит изложение, аргументацию, теоретические обобщения, критический анализ основных результатов, полученных аспирантом в ходе научно-исследовательской работы, в частности, их научной новизны, теоретической и прикладной значимости. В выпускной квалификационной работе представляется оригинальная авторская идея, поставленные научные задачи, этапы исследования, описание теоретических и методологических оснований, методов и инструментария, характер апробации и практического внедрения результатов исследования. Основные результаты выпускной квалификационной работы должны быть на момент государственных аттестационных испытаний опубликованы не менее, чем в 3 печатных изданиях, в том числе – не менее, чем в одном научном рецензируемом издании, включённом в Перечень ВАК, и представлены не менее, чем на одной научной конференции международного, всероссийского, межвузовского уровня. Допускаются публикации в соавторстве. Список публикаций заверяется заведующим выпускающей кафедрой. В Приложение 1 к выпускной квалификационной работе прикладываются ксерокопии титульной страницы издания (выпуска), страница содержания, на которой указано имя автора, ксерокопия текста работы. В приложение 2 включаются документы, подтверждающие результаты внедрения результатов работы в практику или в образовательный процесс (учебные программы, акты о внедрении и т.д.). Другие приложения – факультативны и включают материалы по выбору аспиранта. Рекомендуемый объём выпускной квалификационной работы в форме научного доклада – 35-45 страниц (без учёта приложений), шрифт Times New Roman, размер шрифта 14, межстрочный интервал – 1,5. Первая часть научного доклада содержит общую характеристику исследования и включает традиционные разделы, раскрывающие актуальность избранной темы, степень изученности, цель и задачи исследования, научную новизну, теоретическую и практическую значимость результатов, теоретико-методологическую, эмпирическую, источниковую, экспериментальную базу, арсенал применяемых методов и инструментов. Выделяются положения, выносимые на защиту. Вторая часть научного доклада излагаются основные результаты исследования, ход их получения, их аргументация, детально раскрываются положения и выводы, даются рекомендации по использованию полученных результатов на практике.

4.4. Процедура представления научного доклада об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации)

Выпускная квалификационная работа проходит предварительное обсуждение на кафедре, к которой прикреплен аспирант. Факт допуска кафедрой выпускной квалификационной работы к защите в ходе государственных аттестационных испытаний фиксируется на титульном листе

(«Допущено к защите протокол заседания кафедры _____ от «__» _____ г. № _____) и выпиской из протокола, которая передаётся в необходимые сроки в отдел аспирантуры и докторантуры (на основании чего выпускается приказ о допуске к государственным аттестационным испытаниям). Выпускная квалификационная работа заблаговременно сдаётся в отдел аспирантуры и докторантуры и размещается в электронной образовательной среде. Вместе с работой передаются и размещаются следующие документы: - выписка из протокола заседания кафедры о допуске к защите выпускной квалификационной работы; - список научных публикаций, заверенный заведующим выпускающей кафедры; - справка о проверке на отсутствие некорректных заимствований («Антиплагиат»); - отзыв научного руководителя; - отзыв на выпускную квалификационную работу от одного из педагогов/ научных сотрудников института, имеющих учёную степень кандидата или доктора наук; - отзыв на выпускную квалификационную работу от специалиста по теме научного доклада, имеющего учёную степень кандидата или доктора наук работающего в сторонней организации. Подпись на отзыве заверяется в отделе кадров данной организации.

Выпускная квалификационная работа проходит защиту в ходе государственных аттестационных испытаний. Защита выпускной квалификационной работы проходит в присутствии государственной экзаменационной комиссии и оценивается по пятибалльной системе. Защита включает следующие этапы: 1. Выступление аспиранта 2. Ответы на вопросы государственной экзаменационной комиссии 3. Выступление научного руководителя 4. Обзор отзывов и ответы на замечания, которые в них содержатся 5. Обсуждение выпускной квалификационной работы. По результатам ознакомления с выпускной квалификационной работой, отзывами, результатами защиты, государственная экзаменационная комиссия оценивает работу.

.5 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, владений (навыков и (или) практического опыта деятельности)

4.5.1 Условия допуска обучающегося к итоговой аттестации и порядок ликвидации академической задолженности

5.Рекомендации обучающимся по подготовке научно-квалификационной работы и научного доклада об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации)

5.1.1. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

5.1.2 Учебная литература

Автор	Заглавие	Издательство	Год издания	Ссылка
5.1.3 Основная учебная литература				
Ярошевская, Х. М., Гатауллин, А. Р., Галяметдинов, Ю. Г.	Физическая химия	Казань: Издательство КНИТУ	2019	https://www.iprbooks.hop.ru/121076.html

Ибрагимова Р. И., Пеганова Н. В., Холохонова Л. И., Новоселов Н. П.	Физическая химия. Кинетика и катализ. Кинетические исследования химических процессов	Санкт-Петербург: СПбГУПТД	2021	http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=202168
--	--	------------------------------	------	---

Тимакова, Е. В., Казакова, А. А.	Физическая химия. Неравновесные явления в растворах электролитов	Новосибирск: Новосибирский государственный технический университет	2017	https://www.iprbooks.hop.ru/91474.html
-------------------------------------	---	---	------	---

Липин, В. А., Смирнова, А. И., Суставова, Т. А.	Физическая химия. Электрохимия	Санкт-Петербург: Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна	2020	https://www.iprbooks.hop.ru/118426.html
---	-----------------------------------	--	------	---

Березовчук, А. В.	Физическая химия	Саратов: Научная книга	2019	http://www.iprbookshop.ru/81087.html
-------------------	------------------	------------------------	------	---

Белоусова, Н. В., Васильева, М. Н., Симонова, Н. С., Шиманский, А. Ф.	Физическая химия	Красноярск: Сибирский федеральный университет	2019	http://www.iprbookshop.ru/100142.html
--	------------------	---	------	---

5.1.4 Дополнительная учебная литература

Тимакова Е.В.	Физическая химия. Химическая термодинамика: учеб. пособие	Новосибирск: Новосибирский государственный технический университет	2016	https://ibooks.ru/reading.php?short=1&productid=367469
---------------	--	---	------	---

Тимакова Е.В., Казакова А.А.	Физическая химия. Лабораторный практикум: учебное пособие	Новосибирск: Новосибирский государственный технический университет	2018	https://ibooks.ru/reading.php?short=1&productid=367727
Коган, В. Е., Литвинова, Т. Е., Чиркст, Д. Э., Шахпаронова, Т. С., Чиркст, Д. Э.	Физическая химия	Санкт-Петербург: Национальный минерально-сырьевой университет «Горный»	2014	https://www.iprbookshop.ru/71708.html
Селиванова, Н. М., Павличенко, Л. А., Булидорова, Г. В., Проскурина, В. Е., Галяметдинов, Ю. Г.	Физическая химия	Казань: Казанский национальный исследовательский технологический университет	2016	http://www.iprbookshop.ru/79588.html
Андреев, Л. А., Бокштейн, Б. С., Новикова, Е. А., Родин, А. О., Руднева, Е. В., Астахов, М. В.	Физическая химия	Москва: Издательский Дом МИСиС	2016	http://www.iprbookshop.ru/56609.html

5.2 Перечень профессиональных баз данных и информационно-справочных систем

1. Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам» [Электронный ресурс]. URL:<http://window.edu.ru/>.
2. Электронно-библиотечная система IPRbooks: <http://www.iprbookshop.ru>
3. Электронная библиотека учебных изданий СПбГУПТД: <http://publish.sutd.ru>
4. Единый портал интернет тестирования в сфере образования [Электронный ресурс]. URL:<http://www.i-exam.ru/>.

5.3 Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения

MicrosoftOfficeProfessional
Microsoft Windows

5.4 Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Аудитория	Оснащение
Лекционная аудитория	Мультимедийное оборудование, специализированная мебель, доска
Учебная аудитория	Специализированная мебель, доска