

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Пермский федеральный исследовательский центр
Уральского отделения Российской академии наук
(ФИЦ УрО РАН)



УТВЕРЖДАЮ

Директор ФИЦ УрО РАН

член-корреспондент РАН

А.А. Барях

«28» сентября 2017 г.

**ПРОГРАММА
ГОСУДАРСТВЕННОЙ ИТОГОВОЙ АТТЕСТАЦИИ**

Направление 04.06.01 Химические науки
(код и наименование)

Профили программы аспирантуры 02.00.03 «Органическая химия»
02.00.15 «Кинетика и катализ»

Квалификация выпускника: Исследователь. Преподаватель-исследователь

Форма обучения: Очная

Трудоёмкость:

Кредитов по рабочему учебному плану: 9 ЗЕ
Часов по рабочему учебному плану: 324

Пермь 2017 г.

1. ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

В соответствии с ФГОС ВО аспирантуры по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки, государственная итоговая аттестация выпускников программ аспирантуры 02.00.03 «Органическая химия» и 02.00.15 «Кинетика и катализ» является обязательной, осуществляется после освоения образовательных программ в полном объеме и направлена на установление соответствия уровня профессиональной подготовки выпускников требованиям ФГОС ВО.

Государственная итоговая аттестация выпускников программ аспирантуры 02.00.03 «Органическая химия» и 02.00.15 «Кинетика и катализ» включает сдачу государственного экзамена и защиту научной квалификационной работы на основе результатов научно-исследовательской деятельности.

Государственный экзамен является первым этапом государственной итоговой аттестации обучающихся в аспирантуре по программам подготовки научно-педагогических кадров.

Целью государственного экзамена является определение соответствия результатов освоения обучающимся основной образовательной программы подготовки научно-педагогических кадров требованиям Федерального государственного образовательного стандарта по направлению подготовки.

Задачами государственного экзамена является:

- оценка соответствия универсальных, общепрофессиональных и профессиональных компетенций аспиранта требованиям Федерального государственного образовательного стандарта по направлению подготовки;
- оценка профессиональных знаний, умений и навыков по направлению и профилю подготовки;
- оценка способностей аспиранта к использованию методов философии, педагогики и знаний иностранного языка и литературы при обсуждении специальных вопросов.

Защита научной квалификационной работы является заключительным этапом проведения государственной итоговой аттестации обучающихся в аспирантуре по программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре.

Целью защиты научной квалификационной работы является определение соответствия результатов освоения обучающимися основной образовательной программы подготовки научно-педагогических кадров

требованиям Федерального образовательного стандарта по направлению подготовки.

Задачами научной квалификационной работы являются:

- оценка соответствия универсальных, общепрофессиональных и профессиональных компетенций аспиранта требованиям Федерального образовательного стандарта по направлению подготовки;
- оценка профессиональных знаний, умений и навыков профилю подготовки и квалификации «Исследователь. Преподаватель-исследователь»;
- оценка способностей аспиранта к использованию методов философии, педагогики и знаний иностранного языка при обсуждении профессиональных вопросов.

Научная квалификационная работа выполняется на основе результатов научно-исследовательской работы аспиранта.

Государственная итоговая аттестация аспирантов осуществляется в соответствии с требованиями Федерального закона «Об образовании в Российской Федерации» от 29.12.2012 г. № 273-ФЗ; Постановления Правительства РФ от 29.09.2013 г. № 842 «Положение о порядке присуждения ученых степеней»; приказа Минобрнауки РФ от 19.11.2013 г. № 1259 «Об утверждении порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре)»; приказа Минобрнауки РФ от 30.04.2015 г. № 464 "О внесении изменений в Федеральные государственные образовательные стандарты высшего образования (уровень подготовки кадров высшей квалификации)"; Федеральных образовательных стандартов высшего образования по направлениям подготовки научно-педагогических кадров высшей квалификации, ГОСТа Р 7.0.11-2011 «Диссертация и автореферат диссертации: структура и правила оформления»; Положения о порядке проведения государственной итоговой аттестации по программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре Федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермского федерального исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук.

Нормативные документы:

- Положение о государственной итоговой аттестации;
- Положение о научной квалификационной работе;
- Требования к содержанию и процедуре проведения государственного экзамена;

- Программа государственной итоговой аттестации.

2. ОЦЕНКА СООТВЕТСТВИЯ УНИВЕРСАЛЬНЫХ, ОБЩЕПРОФЕССИОНАЛЬНЫХ И ПРОФЕССИОНАЛЬНЫХ КОМПЕТЕНЦИЙ АСПИРАНТА ТРЕБОВАНИЯМ ФГОС ПО НАПРАВЛЕНИЮ ПОДГОТОВКИ

В результате освоения образовательной программы выпускник должен обладать:

универсальными компетенциями:

- способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);
- способностью проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки (УК-2);
- готовностью участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач (УК-3);
- готовностью использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках (УК-4);
- способностью планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития (УК-5).

общепрофессиональными компетенциями:

- способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);
- готовностью организовать работу исследовательского коллектива в области органической химии и смежных наук (ОПК-2);
- готовностью к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования (ОПК-3).

профессиональными компетенциями:

Направленность подготовки	ПК	Формулировка компетенции
Органическая химия	ПК-1	Способность проводить научные исследования в области органической химии
	ПК-2	Способность планировать и выполнять химические эксперименты, физико-химические расчёты и теоретический

		анализ экспериментальных исследований
	ПК-3	Способность анализировать и устанавливать структуру органических соединений, применяя современные методы физико-химического анализа
Кинетика и катализ	ПК-1	Способность проводить научные исследования в области физической химии
	ПК-2	Способность планировать и выполнять химические эксперименты, физико-химические расчёты и теоретический анализ экспериментальных исследований
	ПК-3	Способность анализировать и устанавливать структуру органических соединений, применяя современные методы физико-химического анализа

Оценка **«отлично»** ставится аспиранту, обнаружившему сформированные универсальные (УК), общепрофессиональные (ОПК) и профессиональные (ПК) компетенции.

Оценка **«хорошо»** ставится аспиранту, обнаружившему сформированные, но содержащие отдельные пробелы компетенции.

Оценка **«удовлетворительно»** ставится аспиранту, обнаружившему фрагментарные пробелы в отдельных компетенциях.

Оценка **«неудовлетворительно»** ставится аспиранту, обнаружившему фрагментарные пробелы во всех компетенциях.

3. ОЦЕНКА ПРОФЕССИОНАЛЬНЫХ ЗНАНИЙ, УМЕНИЙ И НАВЫКОВ ПО НАПРАВЛЕНИЮ И ПРОФИЛЮ ПОДГОТОВКИ

3.1 Программа государственного экзамена

Направленность 02.00.03 «Органическая химия»

1. Органическая химия

Общие вопросы: типы органических реакций – нуклеофильное замещение у насыщенного атома углерода (S_N1 , S_N2); электрофильное замещение в ароматическом ряду, реакции типа Фриделя-Крафтса; электрофильные реакции A_dE ; перегруппировки карбокатионов; радикальные реакции, галогенирование, сульфирование, нитрование, полимеризация; диеновый синтез (реакция Дильса-Альдера).

Гетероциклические соединения: синтез и свойства трёх-, четырёх-, пяти- и шестичленных гетероциклов, содержащих один, два и три гетероатома.

Общие принципы органического синтеза: стратегия, линейный и конвергентный подходы, ретросинтетический анализ. Металлоорганические соединения как С-нуклеофилы, купратные реагенты, образование С-С-связи с использованием катализа комплексами палладия.

Реакции альдольной конденсации, Михаэля, перегруппировки Клайзена и Коупа и их использование в полном синтезе. Синтез энантимерно чистых соединений: основы стереохимии, общие подходы к синтезу энантимерно чистых соединений.

Методы образования карбоциклов: синтез трёх-, четырёх-, пяти- и шестичленных карбоциклов и их прикладное значение.

Литература

1. Смит В., Бочков А., Кейпл Р. Органический синтез. Наука и искусство. М.: Мир, 2001.
2. Заикин В.Г., Варламов А.В., Микая А.И., Простаков Н.С. Основы масс-спектрометрии органических соединений. М.: Наука, 2001.

2. Физическая химия

Основные положения классической теории химического строения. Связь строения и свойств молекул. Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Структурная изомерия. Оптические изомеры. Атомные и молекулярные орбитали. Гибридизация. Электронная плотность. Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий: дисперсионное, электро-ориентационное и электроиндукционное взаимодействие. Водородная связь. Супрамолекулярная химия.

Структурная классификация конденсированных фаз. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Типы дефектов в реальных кристаллах. Строение твердых растворов. Аморфные вещества. Металлы и полупроводники. Различные типы проводимости. Жидкости. Мгновенная и колебательно усреднённая структура жидкости. Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Растворы неэлектролитов. Структура воды и водных растворов. Структура жидких электролитов. Идеальные растворы. Давление насыщенного пара растворов, закон Рауля. Неидеальные растворы. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия. Осмотические явления. Парциальные мольные величины, их определение для бинарных систем.

Уравнение Гиббса–Дюгема. Растворы электролитов. Средняя активность и средний коэффициент активности, их связь с активностью отдельных ионов. Основные положения теории Дебая – Хюккеля. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша.

Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные. Уравнения состояния. Теплота. Работа. Энтальпия. Теплоёмкость. Первый закон термодинамики. Второй закон термодинамики. Энтропия. Абсолютная температура. Фундаментальные уравнения Гиббса. 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. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции. Расчеты констант равновесия химических реакций. Гетерогенные системы: понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса.

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. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций. Период индукции. Тепловой взрыв.

Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации. Теория активных столкновений. Стерический фактор. Теория переходного состояния (активированного комплекса). Путь и координата реакции. Различные типы химических реакций. Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц. Фотохимические и радиационнохимические реакции. Эксимеры и эксиплексы.

Понятие о катализе. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия. Гомогенный катализ. Специфический и общий катализ. Нуклеофильный и электрофильный катализ. Катализ металлокомплексными соединениями. Ферментативный катализ. Адсорбционные и каталитические центры ферментов.

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.

Электрохимические реакции. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Скорость и стадии электродного процесса. Поляризация электродов. Ток обмена и перенапряжение. Химические источники тока, их виды. Электрохимическая коррозия. Методы защиты от коррозии.

Литература

1. Кнорре Д.Г. и др. Физическая химия. М.: ВШ, 1990, 415 с.
2. Панченков Г., Лебедев В. Химическая кинетика и катализ. М.: Химия, 1985, 592 с.

3. Физико-химические методы анализа

Классификация методов количественного анализа. Понятие аналитического сигнала. Основные характеристики методов определения: чувствительность, предел обнаружения, диапазон определяемых содержаний, воспроизводимость, правильность, селективность. Прямые и косвенные способы измерения аналитических сигналов; абсолютные и относительные методы. Классификация погрешностей в количественном анализе. Классификация методов разделения и концентрирования. Сочетание разделения и концентрирования с методами определения. Количественные характеристики разделения и концентрирования. Осаждение и соосаждение. Экстракция. Сорбция.

Классификация спектральных методов. Атомные и молекулярные спектры, их происхождение, вид и основные характеристики. Методы абсорбционной и эмиссионной спектроскопии. Методы атомной спектроскопии. Способы регистрации спектров. Качественный и количественный анализ по спектрам испускания. Методы молекулярной спектроскопии. Техника и методика эксперимента в абсорбционной спектроскопии. Основной закон фотометрии, условия соблюдения закона Бера. Нефелометрический и турбидиметрический методы. Рефрактометрия. Поляриметрия.

Классификация электрохимических методов анализа.

Потенциометрические методы анализа: сущность метода, системы электродов. Потенциометрическое титрование. Потенциометрия с ионселективными электродами. Вольтамперометрия. Поляризационная кривая. Качественный и количественный полярографический анализ. Амперометрия. Типы кривых амперометрического титрования. Кулонометрия. Закон Фарадея. Кулонометрическое титрование. Кондуктометрия и кондуктометрическое титрование. Капиллярный электрофорез.

Хроматография. Классификация хроматографических методов: по агрегатному состоянию фаз, по механизму разделения, по принципу фракционирования, по способу проведения процесса, по аппаратному оформлению, по расположению неподвижной фазы. Хроматографический пик и его параметры. Качественный и количественный анализ. Адсорбционная хроматография. Распределительная хроматография. Детекторы, их классификация. Ионообменная хроматография. Катиониты и аниониты. Комплексообразующие ионообменники. Обменная емкость. Тонкослойная и бумажная хроматография.

Литература

1. Васильев В.П. Аналитическая химия. В 2-х книгах. М.: ВШ, 1989.
2. Л.Н. Москвин, Л.Г. Царицына. Методы разделения и концентрирования в аналитической химии. Л.: Химия, 1991.

4. Современные методы установления структуры органических соединений

Принципиальная схема и принцип работы масс-спектрометра. Методы ионизации и регистрации ионов. Анализ области молекулярного иона в масс-спектре. Определение элементного состава ионов на основании изотопных пиков. Основные правила фрагментации органических соединений при электронном ударе. Перегруппировка Мак-Лафферти.

Характеристические групповые частоты функциональных групп органических молекул в ИК спектрах.

Спектроскопия ЯМР ^1H . Техника эксперимента и подготовка образца. Химический сдвиг. Спин-спиновое взаимодействие, мультиплеты, спиновые системы. Визингальное и геминальное спин-спиновое взаимодействие. Ядерный эффект Оверхаузера.

Спектроскопия ЯМР ^{13}C . Подавление спин-спинового взаимодействия с

протонами. Шкала химических сдвигов. Спин-решеточная релаксация. Анализ спектров.

Совместное использование ИК, ЯМР и масс-спектрометрии для установления природы органических соединений. Решение задач.

Литература

1. М. А. Порай-Кошиц. Основы структурного анализа химических соединений. М.: Высшая школа, 1982.
2. Б. В. Иоффе, Р. Р. Костиков, В. В. Разин. Физические методы определения строения органических соединений. М.: Высшая школа, 1984.

Направленность 02.00.15 «Кинетика и катализ»

1. Органическая химия

Общие вопросы: типы органических реакций – нуклеофильное замещение у насыщенного атома углерода (S_N1 , S_N2); электрофильное замещение в ароматическом ряду, реакции типа Фриделя-Крафтса; электрофильные реакции A_dE ; перегруппировки карбокатионов; радикальные реакции, галогенирование, сульфирование, нитрование, полимеризация; диеновый синтез (реакция Дильса-Альдера).

Гетероциклические соединения: синтез и свойства трёх-, четырёх-, пяти- и шестичленных гетероциклов, содержащих один, два и три гетероатома.

Общие принципы органического синтеза: стратегия, линейный и конвергентный подходы, ретросинтетический анализ. Металлоорганические соединения как C-нуклеофилы, купратные реагенты, образование C-C-связи с использованием катализа комплексами палладия.

Реакции альдольной конденсации, Михаэля, перегруппировки Клайзена и Коупа и их использование в полном синтезе. Синтез энантимерно чистых соединений: основы стереохимии, общие подходы к синтезу энантимерно чистых соединений.

Методы образования карбоциклов: синтез трёх-, четырёх-, пяти- и шестичленных карбоциклов и их прикладное значение.

Литература

1. Смит В., Бочков А., Кейпл Р. Органический синтез. Наука и искусство. М.: Мир, 2001.
2. Заикин В.Г., Варламов А.В., Микая А.И., Простаков Н.С. Основы масс-

спектрометрии органических соединений. М.: Наука, 2001.

2. Физическая химия

Основные положения классической теории химического строения. Связь строения и свойств молекул. Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Структурная изомерия. Оптические изомеры. Атомные и молекулярные орбитали. Гибридизация. Электронная плотность. Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий: дисперсионное, электро-ориентационное и электроиндукционное взаимодействие. Водородная связь. Супрамолекулярная химия.

Структурная классификация конденсированных фаз. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Типы дефектов в реальных кристаллах. Строение твердых растворов. Аморфные вещества. Металлы и полупроводники. Различные типы проводимости. Жидкости. Мгновенная и колебательно усреднённая структура жидкости. Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Растворы неэлектролитов. Структура воды и водных растворов. Структура жидких электролитов. Идеальные растворы. Давление насыщенного пара растворов, закон Рауля. Неидеальные растворы. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия. Осмотические явления. Парциальные мольные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса–Дюгема. Растворы электролитов. Средняя активность и средний коэффициент активности, их связь с активностью отдельных ионов. Основные положения теории Дебая – Хюккеля. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша.

Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные. Уравнения состояния. Теплота. Работа. Энтальпия. Теплоёмкость. Первый закон термодинамики. Второй закон термодинамики. Энтропия. Абсолютная температура. Фундаментальные уравнения Гиббса. 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. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции. Расчеты констант равновесия

химических реакций. Гетерогенные системы: понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса.

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. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций. Период индукции. Тепловой взрыв.

Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации. Теория активных столкновений. Стерический фактор. Теория переходного состояния (активированного комплекса). Путь и координата реакции. Различные типы химических реакций. Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц. Фотохимические и радиационнохимические реакции. Эксимеры и эксиплексы.

Понятие о катализе. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия. Гомогенный катализ. Специфический и общий основной катализ. Нуклеофильный и электрофильный катализ. Катализ металлокомплексными соединениями. Ферментативный катализ. Адсорбционные и каталитические центры ферментов.

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.

Электрохимические реакции. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Скорость и стадии электродного процесса. Поляризация электродов. Ток обмена и перенапряжение. Химические источники тока, их виды. Электрохимическая коррозия. Методы защиты от коррозии.

Литература

1. Кнорре Д.Г. и др. Физическая химия. М.: ВШ, 1990, 415 с.
2. Панченков Г., Лебедев В. Химическая кинетика и катализ. М.: Химия, 1985, 592 с.

3. Физико-химические методы анализа

Классификация методов количественного анализа. Понятие аналитического сигнала. Основные характеристики методов определения: чувствительность, предел обнаружения, диапазон определяемых содержаний, воспроизводимость, правильность, селективность. Прямые и косвенные способы измерения аналитических сигналов; абсолютные и относительные методы. Классификация погрешностей в количественном анализе. Классификация методов разделения и концентрирования. Сочетание разделения и концентрирования с методами определения. Количественные характеристики разделения и концентрирования. Осаждение и соосаждение. Экстракция. Сорбция.

Классификация спектральных методов. Атомные и молекулярные спектры, их происхождение, вид и основные характеристики. Методы абсорбционной и эмиссионной спектроскопии. Методы атомной спектроскопии. Способы регистрации спектров. Качественный и количественный анализ по спектрам испускания. Методы молекулярной спектроскопии. Техника и методика эксперимента в абсорбционной спектроскопии. Основной закон фотометрии, условия соблюдения закона Бера. Нефелометрический и турбидиметрический методы. Рефрактометрия. Поляриметрия.

Классификация электрохимических методов анализа. Потенциометрические методы анализа: сущность метода, системы электродов. Потенциометрическое титрование. Потенциометрия с ионселективными электродами. Вольтамперометрия. Поляризационная кривая. Качественный и количественный полярографический анализ. Амперометрия. Типы кривых амперометрического титрования. Кулонометрия. Закон Фарадея. Кулонометрическое титрование. Кондуктометрия и кондуктометрическое титрование. Капиллярный электрофорез.

Хроматография. Классификация хроматографических методов: по агрегатному состоянию фаз, по механизму разделения, по принципу фракционирования, по способу проведения процесса, по аппаратному оформлению, по расположению неподвижной фазы. Хроматографический пик и его параметры. Качественный и количественный анализ. Адсорбционная хроматография. Распределительная хроматография. Детекторы, их классификация. Ионообменная хроматография. Катиониты и аниониты. Комплексообразующие ионообменники. Обменная емкость.

Тонкослойная и бумажная хроматография.

Литература

1. Васильев В.П. Аналитическая химия. В 2-х книгах. М.: ВШ, 1989.
2. Л.Н. Москвин, Л.Г. Царицына. Методы разделения и концентрирования в аналитической химии. Л.: Химия, 1991.

4. Современные методы установления структуры органических соединений

Принципиальная схема и принцип работы масс-спектрометра. Методы ионизации и регистрации ионов. Анализ области молекулярного иона в масс-спектре. Определение элементного состава ионов на основании изотопных пиков. Основные правила фрагментации органических соединений при электронном ударе. Перегруппировка Мак-Лафферти.

Характеристические групповые частоты функциональных групп органических молекул в ИК спектрах.

Спектроскопия ЯМР ^1H . Техника эксперимента и подготовка образца. Химический сдвиг. Спин-спиновое взаимодействие, мультиплеты, спиновые системы. Вицинальное и геминальное спин-спиновое взаимодействие. Ядерный эффект Оверхаузера.

Спектроскопия ЯМР ^{13}C . Подавление спин-спинового взаимодействия с протонами. Шкала химических сдвигов. Спин-решеточная релаксация. Анализ спектров.

Совместное использование ИК, ЯМР и масс-спектрометрии для установления природы органических соединений. Решение задач.

Литература

1. М. А. Порай-Кошиц. Основы структурного анализа химических соединений. М.: Высшая школа, 1982.
2. Б. В. Иоффе, Р. Р. Костиков, В. В. Разин. Физические методы определения строения органических соединений. М.: Высшая школа, 1984.

3.2 Критерии оценивания ответов на вопросы государственного экзамена

При определении оценки учитывается грамотность предоставленных ответов, стиль изложения и способность ответить на поставленный вопрос по существу.

Ответы на вопросы государственного экзамена оцениваются исходя из следующих критериев:

«Отлично» - содержание ответа исчерпывает содержание вопроса. Аспирант демонстрирует как понимание, так и знание вопроса, а также проявляет способность применить педагогические, исследовательские и информационные компетенции на практике по профилю своего обучения.

«Хорошо» - содержание ответа в основных чертах отражает содержание вопроса. Аспирант демонстрирует как понимание, так и знание вопроса, но обнаруживает незначительные проблемы в проявлении способности применить педагогические, исследовательские и информационные компетенции на практике по профилю своего обучения.

«Удовлетворительно» - содержание ответа в основных чертах отражает содержание вопроса, но допускаются ошибки. Не все положения вопроса раскрыты полностью. Имеются фактические пробелы и неполное владение информацией из учебной литературы. Нарушаются нормы разговорного языка, наблюдается нечеткость и двусмысленность устной речи. Слабая практическая применимость педагогических, исследовательских и информационных компетенций по профилю своего обучения.

«Неудовлетворительно» - содержание ответа не отражает содержание вопроса. Имеются грубые ошибки, а также незнание ключевых определений и информации из учебной литературы. Ответ не носит характер развернутого изложения темы, налицо отсутствие практического применения педагогических, исследовательских и информационных компетенций на практике по профилю своего обучения. Аспиранты, получившие по результатам государственного экзамена оценку «неудовлетворительно», не допускаются к защите научной квалификационной работы.

3.3. Требования к научной квалификационной работе

Защита научной квалификационной работы является заключительным этапом проведения государственной итоговой аттестации обучающихся в аспирантуре по программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре и осуществляется в виде научного доклада, демонстрирующего степень готовности выпускника к ведению профессиональной научно-педагогической деятельности.

Основные результаты научно-исследовательской работы должны быть опубликованы в научных изданиях, индексируемых в реферативных базах данных Web of Science, Scopus, РИНЦ (не менее 3 статей). К публикациям, в которых излагаются основные результаты научно-исследовательской работы аспиранта, приравниваются патенты на изобретения, патенты (свидетельства) на полезную модель, патенты на промышленный образец, патенты на

селекционные достижения, свидетельства на программу для электронных вычислительных машин, базу данных, топологию интегральных микросхем, зарегистрированные в установленном порядке.

Не позднее, чем за 3 дня до даты представления научного доклада, выпускник аспирантуры должен предоставить в экзаменационную комиссию следующие материалы:

- текст научной квалификационной работы,
- текст и презентацию научного доклада,
- две рецензии на научную квалификационную работу,
- список опубликованных работ по теме научной квалификационной работы,
- отзыв научного руководителя.

На заседании экзаменационной комиссии по оценке результатов научной квалификационной работы аспирант выступает с научным докладом продолжительностью 15 мин. Отзыв научного руководителя и рецензии зачитываются председателем экзаменационной комиссии.

В ходе защиты научной квалификационной работы осуществляется итоговый контроль степени сформированности компетенций выпускника аспирантуры.

Результаты научной квалификационной работы определяются оценками «защищено», «не защищено». Оценка «защищено» означает успешное прохождение государственного аттестационного испытания.

Требования к научной квалификационной работе определяются ГОСТ Р 7.0.11-2011 и Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 Органическая химия (уровень подготовки кадров высшей квалификации).

Выполненная научно-исследовательская работа должна соответствовать критериям, установленным для научной квалификационной работы (диссертации) на соискание ученой степени кандидата наук (см. Приложение 1).

Приложение 1.

Критерии, которым должны отвечать диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

1. Диссертация на соискание ученой степени кандидата наук должна быть научной квалификационной работой, в которой содержится решение задачи, имеющей значение для развития соответствующей отрасли знаний, либо изложены новые научно обоснованные технические, технологические или иные решения и разработки, имеющие существенное значение для развития страны.

2. Диссертация должна быть написана автором самостоятельно, обладать внутренним единством, содержать новые научные результаты и положения, выдвигаемые для публичной защиты, и свидетельствовать о личном вкладе автора диссертации в науку.

В диссертации, имеющей теоретический характер, должны приводиться рекомендации по использованию научных выводов.

Предложенные автором диссертации решения должны быть аргументированы и оценены по сравнению с другими известными решениями.

3. Основные научные результаты диссертации должны быть опубликованы в рецензируемых научных изданиях (далее - рецензируемые издания).

4. Требования к рецензируемым изданиям и правила формирования в уведомительном порядке их перечня устанавливаются Министерством образования и науки Российской Федерации.

Перечень рецензируемых изданий размещается на официальном сайте комиссии в информационно-телекоммуникационной сети "Интернет".

5. Количество публикаций, в которых излагаются основные научные результаты диссертации на соискание ученой степени кандидата наук, в рецензируемых изданиях должно быть не менее 3.

6. В диссертации соискатель ученой степени обязан ссылаться на автора и (или) источник заимствования материалов или отдельных результатов.

При использовании в диссертации результатов научных работ, выполненных соискателем ученой степени лично и (или) в соавторстве, соискатель ученой степени обязан отметить в диссертации это обстоятельство.
