

**«Әл-Фараби атындағы ҚазҰУ»
КЕАҚ Ғылыми кеңес отырысында
11.06.2024 ж. №11 хаттамамен
БЕКІТІЛДІ**

**D089 – «Химия»
білім беру бағдарламалары тобына
докторантураға түсушілерге арналған
емтихан бағдарламасы**

1. Жалпы ережелер.

1. Бағдарлама «Жоғары және жоғары оқу орнынан кейінгі білімнің білім беру бағдарламаларын іске асыратын білім беру ұйымдарына оқуға қабылдаудың үлгілік қағидаларын бекіту туралы» Қазақстан Республикасы Білім және ғылым министрінің 2018 жылғы 31 қазандағы № 600 бұйрығына (бұдан әрі – үлгілік қағидалар) сәйкес жасалды.

2. Докторантураға түсу емтиханы сұхбаттасудан, эссе жазудан және білім беру бағдарламалары тобының бейіні бойынша емтиханның тұрады.

Блогы	Балы
1. Сұхбаттасу	30
2. Эссе	20
3. Білім беру бағдарламасы тобының бейіні бойынша емтихан	50
Барлығы/ өту ұпайы	100/75

3. Түсу емтиханының ұзақтығы – 3 сағат 10 минут, осы уақыт ішінде оқуға түсуші эссе жазады, электрондық емтихан билетіне жауап береді. Сұхбаттасу ЖОО қабылдау емтиханының алдында өткізіледі.

1. Түсу емтиханын өткізу тәртібі.

1. D089 - «Химия» білім беру бағдарламалары тобына докторантураға түсушілер проблемалық / тақырыптық эссе жазады. Эссе көлемі – 250-300 сөзден кем болмауы керек.

2. Электрондық емтихан билеті 3 сұрақтан тұрады.

**Білім беру бағдарламасы тобының бейіні бойынша емтиханға
дайындалуға
арналған тақырыптар.**

«Физикалық химияның теориялары мен мәселелері» пәні

Тақырып 1. Химиялық термодинамика.

Термодинамиканың бірінші заңы. Термодинамиканың бірінші заңын кез-келген жүйедегі үрдіс үшін қолдану. Нақты химиялық үрдістер үшін Гесс заңының қолданбалы аспектілері. Термохимия. Бейорганикалық және органикалық заттардың түзілу және жану жылуын есептеудің жуықтау әдістері. Жылу сыйымдылықтың термодинамикалық функцияларымен байланысы. Жылу сыйымдылықтың түрлері. Жылу сыйымдылықтың температураға тәуелділігі. Химиялық реакцияның жылу эффектісінің температураға тәуелділігі.

Тақырып 2. Термодинамиканың екінші заңы.

Термодинамиканың екінші заңының статистикалық негіздемесі. Энтропия. Қайтымды және қайтымсыз үрдістер үшін арналған термодинамиканың екінші заңы. Әр түрлі үрдістер үшін энтропия өзгерісі.

Тақырып 3. Химиялық тепе-теңдік.

Химиялық реакцияның изотерма теңдеуі және тепе-теңдік константасы. Изотерма теңдеуі және химиялық реакцияның бағыты. Тепе-теңдік константасы және реакцияның стандартты Гиббс энергиясы. Тепе-теңдік константасы және реакциялық қоспаның құрамын білдірудің әр түрлі жолдары.

Тақырып 4. Температура мен қысымның тепе-теңдікке константасына әсері.

Қысымның химиялық реакцияның тепе-теңдігіне әсері. Тепе-теңдіктің ығысуының принципі. Тепе-теңдік константасының температураға тәуелділігі. Реакциялардың изобара және изохоралық теңдеулерін талдау. Абсолютті энтропияны қолдану арқылы кез-келген температура кезіндегі химиялық реакциялардың тепе-теңдік константаларын анықтау.

Тақырып 5. Статистикалық термодинамиканың негіздері

Статистикалық термодинамиканың негізгі постулаттары. Жүйенің микро- және макрокүйлері. Термодинамикалық ықтималдықты Больцман әдісімен есептеу. Молекулярлық энергия бойынша таралу заңы. Статистикалық қосындысы. Термодинамикалық функцияларды статистикалық қосындылар арқылы сипаттау. Ілгерілемелі қозғалыстың күй қосындысы. Айналмалы қозғалыстың күй қосындысы. Тербелмелі қозғалыстың күй қосындысы. Электрондық және ядролық күй қосындысы.

Тақырып 6. Электролит ерітінділерінің теориясы

Электролит ерітінділерінің тұрақтылығының негізгі шарты ретінде химиялық өзара әрекеттесу. Кристалдық тордың энергиясы. Кристалдық тордың энергиясын есептеу үшін қолданылатын Борн және Капустинский моделі. Термодинамикалық Борн-Габер циклі. Кристалдық тор энергиясының иондардың радиусына, зарядқа, оның құрамдас иондарының химиялық табиғатына тәуелділігі.

Тақырып 7. Сольваттану энергиясы

Иондардың сольваттануы (гидраттануы). Сольваттану энергиясын есептеу үшін Борн моделі және Борн-Габер термодинамикалық циклы. Сольватацияның

жылулық эффектісі. Сольваттану энтальпиясын есептеу үшін Борн-Бьеррум теңдеуі. Сольваттанудың нақты және химиялық энергиясы. Модель А.Н. Фрумкина. Иондардың сольваттану (гидраттану) жылуының оның қасиеттеріне тәуелділігі: иондардың радиусы, заряды, химиялық табиғаты.

Тақырып 8. Күшті электролиттер теориясы

Льюис пен Рэндаллдың ғылыми жұмыстарындағы ион-иондық өзара әрекеттесудің термодинамикалық сипаттамасы. Дебай-Хюккелдің күшті электролиттер теориясының даму динамикасы. Орташа-иондық активтілік коэффициентін есептеу үшін Гюнтельберг, Гюгенгейм және Девис теңдеулері. Дебай-Хюккель теориясын әлсіз электролит ерітінділері үшін қолдану.

Тақырып 9. Электролит ерітінділерінің электр өткізгіштігі.

Меншікті және молярлы электр өткізгіштік. Әлсіз және күшті электролиттердің электр өткізгіштігінің концентрацияға тәуелділігі. Кольрауш, Дебай-Онзагер заңдары. Электрофоретикалық және релаксациялық эффектілер. Вин және Дебай-Фолькенгаген эффектілері. Ион тасымалдау сандары, тасымалдау сандарын анықтау әдістері.

Тақырып 10. Активті соқтығысу теориясының теориялық және қолданбалы аспектілері.

Молекуланы активтеудің негізгі жолдары, соқтығысу кезінде энергия алмасу. Активті соқтығысу теориясы. Активті соқтығысу теориясы тұрғысынан биомолекулалық реакциялар. Бимолекулалық реакциялардың жылдамдығы және жылдамдық константасы. Аррениус теңдеуіндегі экспоненциалды көбейткішті негіздеу. Мономолекулалық реакциялар. Линдеманның теориясы.

Тақырып 11 Активтенген кешен теориясының теориялық және қолданбалы аспектілері.

Потенциалды энергияның беті. Өтпелі күй теориясы. Активтендірілген кешен теориясының (АКТ) негізгі қағидалары. АКТ негізгі теңдеуі, Эйринга, Эванса және Поляни қорытындысы. Реакцияның жылдамдығы, жылдамдық константасы. Активтендірілген кешен теориясының статистикалық және термодинамикалық аспектілері.

Тақырып 12. Күрделі реакциялардың кинетикалық талдауы

Қайтымды, параллель және дәйекті реакциялардың кинетикасының ерекшеліктері. Реакциялардың стационарлық және квазистационарлық жүруі. Боденштейннің стационарлық шоғырлану әдісі.

Тақырып 13. Адсорбция тепе-теңдігі

Адсорбция изотермасының теңдеулері. Лэнгмюр, Брунауэр-Эмметт-Теллер адсорбциясының изотерма теңдеулері. Гиббстің адсорбция теңдеуі. Беттік-активті және беттік-инактивті заттар. Гидрофильді - липофильді баланс.

Тақырып 14. Электрохимиялық реакцияның кинетикасы.

Электрохимиялық реакцияның жүруінің кинетикалық ерекшеліктері. Электрохимиялық кинетиканың негізгі теңдеуі. Электрохимиялық реакцияның диффузиялық режимі. Электрохимиялық реакцияның жүрудің кинетикалық режимі.

Тақырып 15. Поляризацияның теориялық негіздері

Поляризация, поляризация түрлері, электродтардың поляризациялануының себептері. Шоғырландыру поляризациясы, шоғырландыру (масса ауысу сатысы) поляризациясының негізгі теңдеулері. Электрохимиялық поляризация, катодтық және анодтық поляризация теңдеулері. Тафель теңдеулері.

3. Пайдаланылған әдебиеттер тізімі.

Негізгі:

1. Оспанов Х.Қ., Қамысбаев Д.Х., Абланова Е.Х., Шабикова Г.Х. Физикалық химия. - Өскемен: ШҚМУ баспасы, 1997. - 575 с.
2. Ә. Қ.Оспанова., Г.А. Сейлханова Химиялық кинетика және электрохимия. – Алматы,2006, 2010. 2-ші басылым. – 200 б.
3. Оспанова А.К., Шабикова Г.Х., Сыздыкова Л.И. Физикалық химияның теориялары мен мәселері. Алматы. 2021. с 191
4. Шабикова Г.Х., Оспанова А.К., Ашимхан Н.С. Физикалық химия бойынша есептер мен мысал есептер. – Алматы: КазНУ, 2013. – 272
5. Дамаскин Б.Б., Петрий О.А., Цирлина Г.А. Электрохимия. – М.: Химия, Колос С, 2006. – 672 с.
6. Васильев В.П. Термодинамические свойства эдектролитов. М. 1984.
7. Г.Х. Шабикова, Л.И. Сыздыкова Современное состояние теории сольватации и растворения. Алматы.2010.
8. Оспанова А.К.,Омарова Р.А. Статисткалық термодинамиканың теориялық негіздері. 2011, 101с.

Қосымша:

1. Основы физической химии. Под редакцией академика РАН проф. Лунина. М.: Издательство «Экзамен». – 2005. 480 с.
2. Базаров И. Термодинамика. М.: Высшая школа. 1991. 376 с.
3. Антропов Л.И. Теоретическая электрохимия. М.: Высшая школа. 1984. 519 с.
4. Бакеев М. Основы теории гидратации и растворения солей. - Алматы: Наука, 1990. -55 с.

«Органикалық химияның заманауи мәселелері» пәні

Тақырып. Органикалық құрылыс теориясының кәзіргі жағдайы.

Тақырып мазмұны. Реакциялар мен реагенттердің жіктелуі. Негіздік, нуклеофилділік, электрофилділік, қышқылдық. Қатты және жұмсақ қышқылдар мен негіздердің теориясы.

Тақырып. Молекулалардың реакциялық қабілетін анықтайтын факторлар.

Тақырып мазмұны. Молекулалардың электрлік қасиеттері және молекулааралық күштер. Электронды жұптардың ығысу теориясы. Органикалық қосылыстардың молекуларындағы электрондық эффекттері. Статикалық және динамикалық жүйелердегі индуктивті және мезомерлі эффекттер. Органикалық реакцияның кинетикалық бақылауы.

Тақырып. Радикалды орынбасу реакцияның механизмі

Тақырып мазмұны. Алкилді радикалдар, құрылысы және генерацияның негізгі тәсілдері. Бос радикалдарды анықтау және олардың құрылысын белгілеу

Тақырып. Қаныққан көміртек атомы бойынша нуклеofilді орынбасу.

Тақырып мазмұны. Карбоний және карбений иондар. Карбокатиондардың тұрақтылығына әсер ететін факторлар, орынбасушылардың тұрақтандыру эффектін түсіндіру. S_N1 және S_N2 механизмдері. Тәжірибелік дәлелдемелер. Нуклеofilді орынбасу механизмдеріне әсер ететін факторлар. Мономолекулярлы нуклеofilді орынбасу үрдістердегі иондық жұптар. Стереохимия. Шекара аумағы. Бір электронды ығысу теориясы. Басқа S_N -механизмдер.

Тақырып. Элиминирлеу реакциялары

Тақырып мазмұны. Элиминирлеу реакциялары (E_1 , E_{1cB} , E_2). E_2 -элиминирлеудің стереохимиясы. Элиминирлеу өнімдер құрамында болатын қос байланыстың кеңістікте бағытталуы. Орынбасу мен элиминирлеудің бәсекелестігі.

Тақырып. Қаныққан көміртек атомы бойынша электроphilді орынбасу.

Тақырып мазмұны. Электроphilді орынбасу реакцияның механизмі. Бимолекулярлы және мономолекулярлы реакциялары, стереохимиялары. Нуклеofilды жәрдемдесу. CN -қышқылдардың реакциялары.

Тақырып. Ароматты электроphilді орынбасудың механизм түрлері.

Тақырып мазмұны. Алғашқы және кейінгі ауыспалы күйлер. Протонның бөліну сатысы. Изомерлі σ -комплексстер. Орынбасушылардың жіктелуі. Бағытталу - σ -комплексстің қасиеттерінің көрінісі.

Тақырып. Нуклеofilді ароматты орынбасу.

Тақырып мазмұны. S_NAr реакциялардағы анионды σ -комплексстер. Тұрақтандырушы топтар және нуклеofilдер. Спироциклды σ -комплексстер. Биполярлы σ -комплексстер. σ -Комплексстердің тотығуы. σ -Комплексстердің электроphilдермен әрекеттесуі. Бартоли реакциясы. Кине- және теле-орынбасу. Викариозды нуклеofilді орынбасу. Димрот типті қайта топтасулары.

Тақырып. Перициклді реакциялары.

Тақырып мазмұны. Перициклді реакциялардың жалпы сипаттамасы. Перициклді реакциялардың теориясы (ілімі). Электроциклді реакциялардың теориясы. Циклоқосылудың алтыэлектронды реакциялары.

Тақырып. Молекулаішілік қайта топтасу реакциялары

Тақырып мазмұны. Циклды ауыспалы күйлер. Молекулаішілік қайта топтасу реакциялардың жіктелуі. Сигматропты қайта топтасу реакциялар теориясы. Басқа [1,2]-сигматропты ығысуы. Электронтапшылық көміртек атомына қарай нуклеofilды қайта топтасуы. Вагнер-Меервейн қайта топтасу реакциясы және соған ұқсас үрдістер. Түрлі топтардың кезуі (миграция) жылдамдығы.

Электрофилді қайта топтасу реакциялары. Электрофилді қайта топтасудың механизмдері. Электрофилді қайта топтасу реакциялардағы бірэлектронды ығысуы. Термиялық радикалды қайта топтасу реакциялары. Фотохимиялық қайта топтасу.

Тақырып. Таутомерлі айналымдардың механизмдері туралы кейбір жаңа көзқарастар.

Тақырып мазмұны. Кето-енолды таутомерия. Имин-енаминді таутомерия. Диазолдардағы таутомерия.

3. Пайдаланылған әдебиеттер тізімі.

Негізгі:

- 1.Смит В.А., Дильман А,Д. Основы современного органического синтеза./Учебник для высшей школы/. Бином, 2012
2. Реутов О.А., Курц А. Л., Бутин К.П. Органическая химия. Бином, 2012
3. Смит М.Органическая химия Марча. Реакции, механизмы, строение. / 4 т. Серия: Лучший зарубежный учебник/ 2020
- 4.Травень В.Ф. Органическая химия./ 3 т.: учеб. пособие для вузов/. 2013.

Қосымша:

1. Бутин К.П. Органическая химия. Часть 1,2,3 /Классический университетский учебник/. Бином, 2012
2. Травень В.Ф. Задачи по органической химии. / Учебник для высшей школы/ Бином, 2016

«Бейорганикалық химия» пәні

«Валенттік байланыс әдісі» тақырыбы

«Белгілі бір молекула мен молекулалық ионның түзілуін түсіндіру үшін валенттік байланыс әдісін қолдану» субтақырыбы

«Молекулалық орбитальдар әдісі» тақырыбы

«Белгілі бір молекула мен молекулалық ионның түзілуін түсіндіру үшін молекулалық орбиталь әдісін қолдану» субтақырыбы

«Молекулалық орбиталь диаграммаларын құру» субтақырыбы

«Атом құрылысы. Периодикалық заң» тақырыбы

«Нильс Бор атомының құрылымы моделі» субтақырыбы

«Кешенді қосылыстар» тақырыбы

«Кристалл өрісінің теориясы тұрғысынан күрделі қосылыстардың түзілуі» субтақырыбы

«Валенттік байланыс әдісі тұрғысынан күрделі қосылыстардың түзілуі» субтақырыбы

«Төмен айналымды және жоғары айналымды кешендерді қалыптастыру» субтақырыбы

«Кешенді қосылыстардың үйлестіру формулалары» субтақырыбы
«Химиялық байланыс және молекулалардың құрылымы» тақырыбы
«Коваленттік байланыс» субтақырыбы
«Иондық байланыс» субтақырыбы
«Сутектік байланыс» субтақырыбы
«Металл байланысы» субтақырыбы
«Гиллеспи ережелері. Молекулалардың геометриялық құрылымын болжау» субтақырыбы
«Қатты және сұйық құрылымы» тақырыбы
«Молекулааралық өзара әрекеттесу» субтақырыбы
«Заттың кристалды құрылымы» субтақырыбы
«Аморфное состояние вещества» субтақырыбы
«Сұйықтар» субтақырыбы
«Кристаллогидраттар» субтақырыбы
«Металдардың жалпы қасиеттері» тақырыбы
«Металдардың физикалық және химиялық қасиеттері» субтақырыбы
«Металдардың электрондық құрылымы» субтақырыбы
«Металдардың кристалды құрылымы» субтақырыбы
«Тазалығы жоғары металдарды алу» субтақырыбы
«Бейорганикалық синтез» тақырыбы
«Бейорганикалық заттардың газ фазалық синтезі» субтақырыбы
«Бейорганикалық заттардың қатты фазалық синтезі» субтақырыбы
«Периодтық жүйенің V тобы элементтерінің химиясы» тақырыбы
«Азот пен оның қосылыстарының қасиеттері» субтақырыбы
«Фосфор мен оның қосылыстарының қасиеттері» субтақырыбы
«Сурьма және оның қосылыстарының қасиеттері» субтақырыбы
«Висмут пен оның қосылыстарының қасиеттері» субтақырыбы
«Периодтық жүйенің VI тобы элементтерінің химиясы» тақырыбы
«Күкірт және оның қосылыстарының қасиеттері» субтақырыбы
«Селен және оның қосылыстарының қасиеттері» субтақырыбы
«Хром мен оның қосылыстарының қасиеттері» субтақырыбы
«Периодтық жүйенің VII тобы элементтерінің химиясы» тақырыбы
«Марганец және оның қосылыстарының қасиеттері» субтақырыбы
«Рений және оның қосылыстарының қасиеттері» субтақырыбы

3. Пайдаланылған әдебиеттер тізімі.

Негізгі:

1. Ахметов Н.С. Общая и неорганическая химия: учебник. Санкт-Петербург, «Лань», 2018. -744 с.

«Аналитикалық химия» пәні

Тақырып 1. Реалды ерітінділердегі гомогенді тепе-теңдіктер. Аналитикалық реакциялардың тепе-теңдік константалары. Олардың кинетикалық және термодинамикалық қорытылуы.

Тақырып 2. Реалды ерітінділердегі гетерогенді тепе-теңдіктер. Аналитикалық реакциялардың тепе-теңдік константалары. Олардың кинетикалық және термодинамикалық қорытылуы.

Тақырып 3. Бір және көпнегізді әлсіз қышқылдардың әр түрлі күйлерінің таралу диаграммалары. Қышқылдың әр түрлі күйлерінің мольдік мөлшерінің ерітіндінің рН-на тәуелділік графиктері. Таралу диаграммаларын құру және талдау (α – рН).

Тақырып 4. Комплекс түзілу үдерістеріндегі тепе-теңдіктер. Көпсатылы комплекстүзілу реакциясын Бьерум әдісімен зерттеу. Комплекстүзілу функциясы (Бьерум функциясы). Комплекстүзілу қисығы.

Тақырып 5. Әр түрлі құрамды комплекстер үшін көпсатылы комплекстүзілу қисығын (η – рL) құру. Комплекстүзілу қисықтарын талдау.

Тақырып 6. Катиондардың комплекстүзілу дәрежесінің лиганд концентрациясына тәуелділігін (α – рL) графиктік бейнелеу. Таралу диаграммалары. Әр түрлі комплексті қосылыстардың таралу диаграммаларын құру және талдау.

Тақырып 7. Аналитикалық химияда қолданылатын тотығу-тотықсыздану үдерістеріндегі тепе-теңдіктер. Таралу диаграммалары. Редокс-жұптардың әр түрлі формаларының мольдік үлестерінің жүйе потенциалына тәуелділігі.

Тақырып 8. "Қатты фаза-қаныққан ерітінді" жүйесіндегі тепе-теңдіктер. Тұнбаның аттас ионы қатысында көпсатылы комплекстүзілу реакцияларының тұнба ерігіштігіне әсері. « $S_{\text{тұнба}}$ – рAn» тәуелділігін қорыту (күміс галогенидінің мысалында).

Тақырып 9. Гетерогенді тепе-теңдік. Кейбір аз еритін электролиттердің өзара бір-біріне ауысу заңдылықтары. Оларды химиялық талдауда қолдану мысалдары.

Тақырып 10. Күрделі құрамды нақты нысандардағы әр түрлі компоненттердің: металдар, бейметалдар, тұздар, қышқылдар және т.б. қоспалары мөлшерлерін анықтау. Берілген нысанда бірге жүрген қоспа компоненттерін талдау сызбанұсқасын, оларды бөлу және сандық анықтау әдістерін таңдау.

Тақырып 11. Қышқылды-негіздік тепе-теңдік: а) күшті қышқылдардың, негіздердің; б) әлсіз қышқылдардың, негіздердің өте сұйылтылған ерітінділерінің рН анықтауға *есептер шығару*.

Тақырып 12. Қышқыл-негізгі тепе-теңдік. Сұйытылған ерітінділер қоспаларының рН-ын анықтауға *есептер шығару*: а) күшті және әлсіз қышқылдар қоспалары; б) күшті және әлсіз негіздер қоспалары.

Тақырып 13. Тұздардың сұйытылған ерітінділеріндегі иондық тепе-теңдіктер. Орта, қышқыл, амфотерлі тұздардың сұйылтылған ерітінділерінің рН анықтауға *есептер шығару*.

Тақырып 14. Буферлі қоспалар ерітінділеріндегі иондық тепе-теңдіктер: күшті орта әлсіз қышқылдар ($h_{\text{дисс.}} > 5\%$) түзетін буферлі ерітінділердің қышқылдығы мен буферлік сыйымдылығын анықтауға *есептер шығару*.

Тақырып 15. Тұндыру реакцияларындағы иондық тепе-теңдіктер. Әртүрлі жанама үдерістердің: а) гидролиз және протондану; б) көп сатылы кешен түзілу және протондану - әсерлерін ескере отырып, тұнбаның ерігіштігін есептеуге *есептер шығару*.

3. Пайдаланылған әдебиеттер тізімі.

Негізгі:

1. Матакова Р.Н., Наурызбаев М.К. Аналитикалық химияның теориялық негіздері. Алматы: ҚазҰУ, 2006. – 120 б.
2. Бадавамова Г.Л., Минажева Г.С. Аналитикалық химия. Оқулық. Алматы: Экономика, 2011. – 474 б.
3. Золотов Ю.А. Основы аналитической химии в 2 кн. М.: Высшая школа, 2004. –361с.
4. Золотов Ю.А. и др. Основы аналитической химии. Задачи и вопросы. М.: ВШ, 2002. – 412с.
5. Дорохова Е.Н., Прохорова Г.В. Задачи и вопросы по аналитической химии. М.: Мир, 2001.-267 с.
6. Золотов Ю.А. и др. Основы аналитической химии. Практическое руководство. М.: ВШ, 2018. – 462с.

Қосымша:

1. Скуг Д., Уэст Д. Основы аналитической химии в 2 ч. М.: ВШ, 1982.–480с.
2. Янсон Э.Ю. Теоретические основы аналитической химии М.: ВШ, 1987. - 304с.
3. Васильев В.П. и др. Аналитическая химия. Сборник вопросов и задач.М.: Дрофа, 2004. – 318с.
4. Аналитическая химия. Проблемы и подходы./ Подред.Р.Кельнер, Ж.-М.Мерме, М.Отто. Пер.с англ. В 2-х томах. Мир, 2004.
5. Кристиан Г. Аналитическая химия. Лучший зарубежный учебник. В 2 томах. М.: Бинном, 2009. –504с.