

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное научное учреждение  
«Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр  
Сибирского отделения Российской академии наук»  
(КНЦ СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН)



УТВЕРЖДАЮ:

Директор ФИЦ КНЦ СО РАН

А.А. Шпедт

2022г.

**ПРОГРАММА КАНДИДАТСКОГО ЭКЗАМЕНА  
ПО СПЕЦИАЛЬНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ**

**«Физическая химия»**

Научная специальность:  
**1.4.4 «Физическая химия»**

Отрасль наук:  
химические, физико-математические и технические науки

Красноярск 2022

## 1 Общие положения

Программа кандидатского экзамена разработана на кафедре фундаментальных дисциплин и методологии науки факультета подготовки кадров ФИЦ КНЦ СО РАН в соответствии со следующими документами:

- Приказом Министерства науки и высшего образования РФ от 20 октября 2021 г. №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)»;
- Постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842 «О порядке присуждения ученых степеней»;
- Положением о подготовке научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре ФИЦ КНЦ СО РАН;
- Порядком сдачи кандидатских экзаменов и прикрепления лиц к ФИЦ КНЦ СО РАН для сдачи кандидатских экзаменов;
- Паспортом научной специальности.

Цель проведения экзамена: оценить уровень знаний, умений и навыков в области физической химии.

Экзамен по специальной дисциплине должен выявить уровень теоретической и профессиональной подготовки экзаменуемого, знание общих концепций и методологических вопросов данной науки, истории ее формирования и развития, фактического материала, основных теоретических и практических проблем данной отрасли знаний.

К кандидатскому экзамену допускаются лица, прикрепленные к ФИЦ КНЦ СО РАН для сдачи кандидатских экзаменов без освоения программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре, и аспиранты, обучающиеся в ФИЦ КНЦ СО РАН по программам подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (далее – экзаменуемые).

Кандидатский экзамен по дисциплине «Физическая химия» проводится по билетам. Экзаменационный билет включает в себя три теоретических вопроса по данной научной специальности и отрасли науки, по которой подготавливается или подготовлена диссертация.

## 2 Содержание программы кандидатского экзамена

### I. Строение вещества

1. *Основы классической теории химического строения.* Основные положения классической теории химического строения. Структурная формула и граф молекулы. Изомерия. Конформации молекул. Связь строения и свойств молекул.

2. *Физические основы учения о строении молекул.* Механическая модель молекулы. Потенциалы парных взаимодействий. Методы молекулярной механики и молекулярной динамики при анализе строения молекул.

Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Стационарное уравнение Шрёдингера для свободной молекулы. Адиабатическое приближение. Электронное волновое уравнение.

Потенциальные кривые и поверхности потенциальной энергии. Их общая структура и различные типы. Равновесные конфигурации молекул. Структурная изомерия. Оптические изомеры.

Колебания молекул. Нормальные колебания, амплитуды и частоты колебаний, частоты основных колебательных переходов. Колебания с большой амплитудой.

Вращение молекул. Различные типы молекулярных волчков. Вращательные уровни энергии.

Электронное строение атомов и молекул. Одноэлектронное приближение. Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Правило Хунда. Электронная плотность. Распределение электронной плотности в двухатомных молекулах. Корреляционные орбитальные диаграммы. Теорема Купманса. Пределы применимости одноэлектронного приближения.

Интерпретация строения молекул на основе орбитальных моделей и исследования распределения электронной плотности. Локализованные молекулярные орбитали. Гибридизация.

Электронная корреляция в атомах и молекулах. Её проявления в свойствах молекул. Метод конфигурационного взаимодействия.

Представления о зарядах на атомах и порядках связей. Различные методы выделения атомов в молекулах. Корреляции дескрипторов электронного строения и свойств молекул. Индексы реакционной способности. Теория граничных орбиталей.

3. *Симметрия молекулярных систем.* Точечные группы симметрии молекул. Понятие о представлениях групп и характерах представлений. Общие свойства симметрии волновых функций и потенциальных поверхностей молекул. Классификация квантовых состояний атомов и молекул по симметрии. Симметрия атомных и молекулярных орбиталей,  $\sigma$ - и  $\pi$ -орбитали.  $\pi$ -Электронное приближение.

Влияние симметрии равновесной конфигурации ядер на свойства молекул и их динамическое поведение. Орбитальные корреляционные диаграммы. Сохранение орбитальной симметрии при химических реакциях.

4. *Электрические и магнитные свойства.* Дипольный момент и поляризуемость молекул. Магнитный момент и магнитная восприимчивость. Эффекты Штарка и Зеемана. Магнитно-резонансные методы исследования строения молекул. Химический сдвиг.

Оптические спектры молекул. Вероятности переходов и правила отбора при переходах между различными квантовыми состояниями молекул. Связь спектров молекул с их строением. Определение структурных характеристик молекул из спектроскопических данных.

5. *Межмолекулярные взаимодействия.* Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий. Молекулярные комплексы. Ван-дер-ваальсовы молекулы. Кластеры атомов и молекул. Водородная связь. Супермолекулы и супрамолекулярная химия.

6. *Основные результаты и закономерности в строении молекул.* Строение молекул простых и координационных неорганических соединений. Полиядерные комплексные соединения. Строение основных типов органических и элементоорганических соединений. Соединения включения. Полимеры и биополимеры.

7. *Строение конденсированных фаз.* Структурная классификация конденсированных фаз.

Идеальные кристаллы. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах. Кристаллы с неполной упорядоченностью. Доменные структуры.

Симметрия кристаллов. Кристаллографические точечные группы симметрии, типы решеток, сингонии. Понятие о пространственных группах кристаллов. Индексы кристаллографических граней.

Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов. Цепочечные, каркасные и слоистые структуры.

Строение твердых растворов. Упорядоченные твердые растворы. Аморфные вещества. Особенности строения полимерных фаз.

Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов. Поверхность Ферми. Различные типы проводимости. Колебания в кристаллах. Фононы.

Жидкости. Мгновенная и колебательно усреднённая структура жидкости. Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Флуктуации и корреляционные функции. Структура простых жидкостей. Растворы неэлектролитов. Структура воды и водных растворов. Структура жидких электролитов.

Мицеллообразование и строение мицелл.

Мезофазы. Пластические кристаллы. Жидкие кристаллы (нематики, смектики, холестерики и др.).

8. *Поверхность конденсированных фаз.* Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей, структура границы раздела

конденсированных фаз. Молекулы и кластеры на поверхности. Структура адсорбционных слоев.

## **Химическая термодинамика**

### ***Основные понятия и законы термодинамики***

1. Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, интенсивные и экстенсивные переменные. Уравнения состояния. Теорема о соответственных состояниях. Вириальные уравнения состояния.

2. *Первый закон термодинамики.* Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия, теплоемкость. Закон Гесса. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгоффа. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах.

3. *Второй закон термодинамики.* Энтропия и её изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно – Клаузиуса. Различные шкалы температур.

Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца. Уравнения Максвелла. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов.

Уравнение Гиббса – Гельмгольца. Работа и теплота химического процесса. Химические потенциалы.

4. *Химическое равновесие.* Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций. Приведенная энергия Гиббса и её использование для расчетов химических равновесий. Равновесие в поле внешних сил. Полные потенциалы.

### ***Элементы статистической термодинамики***

5. Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые Г- и  $\mu$ -пространства. Эргодическая гипотеза. Термодинамическая вероятность и её связь с энтропией. Распределение Максвелла – Больцмана.

Статистические средние значения макроскопических величин. Ансамбли Гиббса. Микроканоническое и каноническое распределения. Расчет числа состояний в квазиклассическом приближении.

Каноническая функция распределения Гиббса. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция. Статистические выражения для

основных термодинамических функций. Молекулярная сумма по состояниям и сумма по состояниям макроскопической системы. Поступательная, вращательная, электронная и колебательная суммы по состояниям. Статистический расчет энтропии. Постулат Планка и абсолютная энтропия., Приближение «жесткий ротатор – гармонический осциллятор». Составляющие внутренней энергии, теплоёмкости и энтропии, обусловленные поступательным, вращательным и колебательным движением.

Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики. Статистическая термодинамика реальных систем. Потенциалы межмолекулярного взаимодействия и конфигурационный интеграл для реального газа.

Распределения Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака. Вырожденный идеальный газ. Электроны в металлах. Уровень Ферми. Статистическая теория Эйнштейна идеального кристалла, теория Дебая. Точечные дефекты кристаллических решеток. Равновесные и неравновесные дефекты. Вычисление сумм по состояниям для кристаллов с различными точечными дефектами. Нестехиометрические соединения и их термодинамическое описание.

### *Элементы термодинамики необратимых процессов*

6. Основные положения термодинамики неравновесных процессов. Локальное равновесие. Флуктуации. Функция диссипации. Потоки и силы. Скорость производства энтропии. Зависимость скорости производства энтропии от обобщенных потоков и сил. Соотношения взаимности Онсагера. Стационарное состояние системы и теорема Пригожина. Термодиффузия и её описание в неравновесной термодинамике. Уравнение Чепмена – Энскога.

### *Растворы. Фазовые равновесия*

7. *Различные типы растворов.* Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение.

Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонент растворов. Симметричная и несимметричная системы отсчета.

Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия. Зонная плавка. Осмотические явления. Парциальные мольные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса – Дюгема.

Функция смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства.

8. *Гетерогенные системы.* Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса.

Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды, серы, фосфора и углерода. Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона – Клаузиуса.

Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Равновесие жидкость – пар в двухкомпонентных системах. Законы Гиббса – Коновалова. Азеотропные смеси.

Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста.

Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.

### *Адсорбция и поверхностные явления*

9. *Адсорбция.* Адсорбент, адсорбат. Виды адсорбции. Структура поверхности и пористость адсорбента. Локализованная и делокализованная адсорбция. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Динамический характер адсорбционного равновесия.

Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Ленгмюра. Адсорбция из растворов. Уравнение Брунауэра – Эмета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента.

Хроматография, различные её типы (газовая, жидкостная, противоточная и др.).

10. *Поверхность раздела фаз.* Свободная поверхностная энергия, поверхностное натяжение, избыточные термодинамические функции поверхностного слоя. Изменение поверхностного натяжения на границе жидкость – пар в зависимости от температуры. Связь свободной поверхностной энергии с теплотой сублимации (правило Стефана), модулем упругости и другими свойствами вещества.

Эффект Ребиндера: изменение прочности и пластичности твердых тел вследствие снижения их поверхностной энергии.

Капиллярные явления. Зависимость давления пара от кривизны поверхности жидкости. Капиллярная конденсация. Зависимость растворимости от кривизны поверхности растворяющихся частиц (закон Гиббса – Оствальда – Фрейндлиха).

### *Электрохимические процессы*

11. Растворы электролитов. Ион-дипольное взаимодействие, как основной процесс, определяющий устойчивость растворов электролитов. Коэффициенты активности в растворах электролитов. Средняя активность и

средний коэффициент активности, их связь с активностью отдельных ионов. Основные положения теории Дебая – Хюккеля. Потенциал ионной атмосферы.

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. Определение коэффициентов активности на основе измерений ЭДС гальванического элемента.

Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты.

## **Кинетика химических реакций**

### *Химическая кинетика*

1. *Основные понятия химической кинетики.* 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.

2. *Феноменологическая кинетика* сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций. Квазистационарное приближение. Метод Боденштейна – Тёмкина. Кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса – Ментен. Цепные реакции. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций. Кинетические особенности разветвленных цепных реакций. Предельные явления в разветвленных цепных реакциях. Полуостров воспламенения, период индукции. Тепловой взрыв. Реакции в потоке. Реакции идеального вытеснения и идеального смешения. Колебательные реакции.

3. *Макрокинетика.* Роль диффузии в кинетике гетерогенных реакций. Кинетика гетерогенных каталитических реакций. Различные режимы протекания реакций (кинетическая и внешняя кинетическая области, области внешней и внутренней диффузии).

4. Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы её определения.

5. *Элементарные акты химических реакций* и физический смысл энергии активации. Термический и нетермические пути активации молекул. Обмен энергией (поступательной, вращательной и колебательной) при столкновениях молекул. Время релаксации в молекулярных системах.

Теория активных столкновений. Сечение химических реакций. Формула Траутца – Льюиса. Расчет предэкспоненциального множителя по молекулярным постоянным. Стерический фактор.

Теория переходного состояния (активированного комплекса). Поверхность потенциальной энергии. Путь и координата реакции. Статистический расчет константы скорости. Энергия и энтропия активации. Использование молекулярных постоянных при расчете константы скорости.

6. *Различные типы химических реакций.* Мономолекулярные реакции в газах, схема Линдемана – Христиансена. Теория РРКМ. Бимолекулярные и тримолекулярные реакции, зависимость предэкспоненциального множителя от температуры.

Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц. Клеточный эффект и сольватация.

Фотохимические и радиационнохимические реакции. Элементарные фотохимические процессы. Эксимеры и эксиплексы. Изменение физических и химических свойств молекул при электронном возбуждении. Квантовый выход. Закон Эйнштейна – Штарка.

7. Электрохимические реакции. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Теория Гуи – Чапмена – Грэма.

Электрокапллярные явления, уравнение Липпмана.

Скорость и стадии электродного процесса. Поляризация электродов. Полярография. Ток обмена и перенапряжение. Зависимость скорости стадии разряда от строения двойного слоя.

Химические источники тока, их виды. Электрохимическая коррозия. Методы защиты от коррозии.

## *Катализ*

8. *Классификация каталитических реакций* и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия.

9. *Гомогенный катализ.* Кислотно-основной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гаммета. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Брэнстеда. Корреляционные уравнения для энергий активации и теплот реакций. Специфический и общий основной катализ. Нуклеофильный и электрофильный катализ.

Катализ металлокомплексными соединениями. Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы.

10. *Ферментативный катализ.* Адсорбционные и каталитические центры ферментов. Активность и субстратная селективность ферментов. Коферменты. Механизмы ферментативного катализа.

11. *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. Современные теории функционирования гетерогенных катализаторов. Основные промышленные каталитические процессы.

### **Перечень вопросов к кандидатскому экзамену по дисциплине «Физическая химия»**

1. Общие принципы образования химических связей.
2. Основные приближения при решении квантово-химических задач.
3. Методы выбора волновой функции молекулы.
4. Методы решения уравнения Шредингера.
5. Элементы симметрии молекул.
6. Работа идеального газа в адиабатическом процессе.
7. Расчет тепловых эффектов химических реакций. Приближенные методы расчета.
8. Калориметрические методы измерения тепловых эффектов.
9. Расчеты энергий Гиббса и Гельмгольца с применением таблиц стандартных величин.
10. Соотношения Максвелла.
11. Парциальные мольные величины, химический потенциал.
12. Уравнение Гиббса – Дюгема.
13. Закон действующих масс, константа равновесия.
14. Уравнение изотермы химической реакции Вант-Гоффа.
15. Зависимость константы равновесия от температуры.
16. Статистическое определение энтропии.
17. Расчет констант равновесия с использованием статистических сумм.
18. Криоскопия.
19. Осмотические явления.
20. Условие термодинамического равновесия в гетерогенных системах, правило фаз Гиббса.
21. Однокомпонентные системы, уравнение Клаузиуса-Клапейрона.
22. Диаграммы состояния двухкомпонентных азеотропных систем.
23. Диаграммы X-Y переходов жидкость – пар.
24. Диаграммы плавкости двухкомпонентных систем.
25. Системы с образованием конгруэнтно и инконгруэнтно плавящихся соединений.
26. Физико-химический анализ.
27. Расчеты по диаграммам состояния. Правило рычага.
28. Расчеты ректификационных процессов.
29. Основной постулат химической кинетики.
30. Размерность константы скорости химической реакции.
31. Необратимые реакции нулевого порядка.
32. Кинетика последовательных реакций.

33. Лимитирующая стадия.
34. Принцип квазистационарных концентраций Боденштейна.
35. Уравнение Михаэлиса – Ментен.
36. Кинетика реакций в потоке.
37. Теория переходного состояния.
38. Скорость гетерогенных химических процессов.
39. Диффузия и массоперенос. Закон Фика.
40. Гетерогенные и гетерофазные химические процессы.
41. Кинетическая и диффузионная области протекания гетерогенных процессов.
42. Катализ, энтропийная и активационная природа катализа.
43. Специфический и общий кислотно-основной катализ.
44. Катализ в технологии неорганических веществ.
45. Каталитический крекинг и гидрокрекинг.
46. Каталитический риформинг.
47. Равновесия в растворах электролитов.
48. Основные механизмы переноса заряда в растворах, расплавах и твердых электролитах.
49. Удельная и молярная электропроводности.
50. Предельная молярная электропроводность сильных и слабых электролитов, ее определение.
51. Кондуктометрический метод определения степени и константы электролитической диссоциации.
52. Электродные потенциалы. Уравнение Нернста.
53. Концентрационная и химическая поляризация. Поляризационные кривые.
54. Основные положения теории Лэнгмюра.
55. Изотерма многоцентровой адсорбции на однородных поверхностях.
56. Проверка соответствия опытных данных данной изотерме сорбции.
57. Определение поверхности твердых тел на основании адсорбционных данных (метод Лэнгмюра, БЭТ, Гаркинса и Юра).
58. Особенности адсорбции веществ в микропорах.
59. Свойства химических соединений, определяющие химический сдвиг в спектрах ЯМР.
60. Свойства химических соединений, определяющие сверхтонкую структуру спектров ЯМР.
61. Свойства химических соединений, определяющие время удерживания пика в газовой хроматографии.
62. Свойства химических соединений, определяющие интенсивность сигнала пламенноионизационного детектора.
63. Современные квантово-химические методы расчета, их основные отличия.
64. Основные приближения при расчете молекул в методах функционала плотности.
65. Основные физико-химические свойства молекул, получаемые из

расчетов.

66. Поверхность потенциальной энергии: локальные минимумы и седловые точки.
67. Алгоритм поиска переходных состояний.
68. Каталитические процессы переработки биомассы.
69. Метод внутреннего стандарта в ГЖХ.

#### 4 Критерии оценивания ответа

Отлично	Полно раскрыто содержание вопросов; материал изложен грамотно, в определенной логической последовательности, правильно используется терминология; показано умение иллюстрировать теоретические положения конкретными примерами, применять их в новой ситуации; продемонстрировано усвоение ранее изученных сопутствующих вопросов, ответ прозвучал самостоятельно, без наводящих вопросов.
Хорошо	Ответ удовлетворяет в основном требованиям на оценку «отлично», но при этом может иметь следующие недостатки: в изложении допущены небольшие пробелы, не исказившие содержание ответа допущены один -два недочета при освещении основного содержания ответа, исправленные по замечанию; допущены ошибка или более двух недочетов при освещении второстепенных вопросов, которые легко исправляются по замечанию
Удовлетворительно	Неполно или непоследовательно раскрыто содержание материала, но показано общее понимание вопроса. Имелись затруднения или допущены ошибки в определении понятий, использовании терминологии, исправленные после нескольких наводящих вопросов.
Неудовлетворительно	Имели место существенные упущения при ответах на все вопросы билета или полное несоответствие по более чем 50% материала вопросов билета

#### 5 Учебно-методическое и информационное обеспечение

##### Основная литература

1. Беляев, Алексей Петрович. Физическая и коллоидная химия [Текст] / А. П. Беляев, В. И. Кучук ; под ред. А. П. Беляева. - 2-е изд., перераб. и доп. - Москва : ГЭО ТАР-Медиа, 2012. - 751 с.

2. Бёккер Ю. Спектроскопия [Текст] / Ю. Бёккер. - М. : Техносфера, 2009. - 527 с.
3. Бёккер Ю. Хроматография. Инструментальная аналитика: методы хроматографии и капиллярного электрофореза [Текст] / Ю. Бёккер ; пер. В. С. Курова ; ред. пер. А. А. Курганов. - М. : Техносфера, 2009. - 470 с.
4. Быков, Валерий Иванович. Нелинейные модели химической кинетики [Текст] / В. И. Быков, С. Б. Цыбенкова. - М. : Красанд, 2011. - 396 с.
5. Гельман, Ганс Густавович. Квантовая химия [Текст] / Г. Гельман ; с предисл. и коммент. А. Л. Чугреева и доп. Г. Гельмана мл. - 2-е изд., доп. - Москва : Бином. Лаборатория знаний, 2011. - 533 с.
6. Еремин В.В. Основы физической химии. Учебное пособие в 2-х частях. Еремин В.В., Каргов С.И., Успенская И.А., Кузьменко Н.Е., Лунин В.В. - Москва: Бином, 2013. – 600 с.
7. Карапетьянц, Михаил Христофорович. Примеры и задачи по химической термодинамике [Текст] / М. Х. Карапетьянц. - Изд. 5-е. - Москва : URSS ; Москва : Либроком, 2012. - 301 с.
8. Каржавин, Владимир Константинович. Термодинамические величины химических элементов и соединений [Текст] / В. К. Каржавин ; Рос. акад. наук, Кол. науч. центр, Геол. ин-т. - Апатиты : КНЦ РАН, 2011. - 160 с.
9. Киселев М. Г. Теоретические и экспериментальные методы химии растворов [Текст] / Киселев М. Г., С. Ю. Носков, Ю. П. Пуховский и др.; отв. ред. А. Ю. Цивадзе ; Рос. акад. наук, Ин-т химии растворов. - Москва : Проспект, 2011. - 683 с.
10. Кук Д. Квантовая теория молекулярных систем. Единый подход [Текст] / Д. Кук ; пер. с англ. Б. К. Новосадова. - Долгопрудный : Интеллект, 2012. - 255 с.
11. Лейкин, Юрий Алексеевич. Физико-химические основы синтеза полимерных сорбентов [Текст] / Ю. А. Лейкин. - Москва : Бином. Лаборатория знаний, 2011. - 413 с.
12. Неравновесные физико-химические процессы в газовых потоках и новые принципы организации горения [Текст] / под ред. А. М. Старика. - Москва : Торус Пресс, 2011. - 845 с.
13. Нестеренко П. Н. Высокоэффективная комплексообразовательная хроматография ионов металлов [Текст] / П. Нестеренко, Ф. Джонс, Б. Полл ; пер. с англ. Е. П. Нестеренко под ред. П. Н. Нестеренко. - Москва : Техносфера, 2013. - 311 с.
14. Пригожин И. Химическая термодинамика [Текст] / И. Пригожин, Р. Дефэй ; пер. с англ. В. А. Михайлов. - 2-е изд. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. - 533 с. - Пер.изд.: Chemical Thermodynamics / Prigogine I., Defay R. - Библиогр.: с. 472-475.
15. Прокофьев, Валерий Юрьевич. Основы физико-химической механики экструдированных катализаторов и сорбентов [Текст] / В. Ю.

- Прокофьев, П. Б. Разговоров, А. П. Ильин ; Иван. гос. хим.-технол. ун-т. - М:КРАСАНД, 2013. - 314 с.
16. Сычев К. С. Практическое руководство по жидкостной хроматографии [Текст] / К. С. Сычев. - М. : Техносфера, 2010. - 250 с.
  17. Томашпольский, Юрий Яковлевич. Поверхностная автосегрегация в химических соединениях [Текст] / Ю. Я. Томашпольский. - Москва : Научный мир, 2013. - 206 с.
  18. Уманский С. Я. Теория элементарных химических реакций [Текст] / С. Я. Уманский. - Долгопрудный : Интеллект, 2009. - 407 с.
  19. Урьев Н. Б. Физико-химическая динамика дисперсных систем и материалов: фундаментальные аспекты, технологические приложения [Текст]/ Н. Б. Урьев. - Долгопрудный : Интеллект, 2013. - 231 с.
  20. Цивадзе А. Ю. Физическая химия адсорбционных явлений [Текст] / Цивадзе А. Ю., Русанов А. И., Фомкин А. А. и др.; Рос. акад. наук, Отд-ние химии и наук о материалах, Науч. совет РАН по физ. химии, Ин-т физ. химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН. - Москва : Граница, 2011. – 301 с.
  21. Цивадзе А.Ю. Адсорбция, адсорбенты и адсорбционные процессы в нанопористых материалах : [Текст] / Под ред. А.Ю. Цивадзе - М. : Граница, 2011. - 489 с.
  22. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и тела [Текст] / В. Г. Цирельсон. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. - 495 с.
  23. Шутилин, Юрий Федорович. Физикохимия полимеров [Текст] / Ю. Ф. Шутилин. - Воронеж : Воронежская обл. типография, 2012. - 838 с.

## 5.2 Дополнительная литература

1. Александров К. С. Кристаллохимия неорганических соединений с пятью анионами: многообразие структур, возможности синтеза новых соединений, области использования [Текст] / К. С. Александров, Б. В. Безносиков Рос. акад. наук, Сиб. отд-ние, Институт физики им. Л. В. Киренского. - Красноярск : Изд-во ИФ СО РАН, 2010. - 203 с.
2. Безносиков Борис Валерьевич. Кристаллохимия структурных антиподов неорганических соединений. Возможности синтеза новых соединений [Текст] / Б. В. Безносиков ; отв. ред. С. Д. Кирик ; Рос. акад. наук, Сиб. отд-ние, Ин-т физики им. Л.В. Киренского. - Красноярск : ИФ СО РАН, 2012. - 117 с.
3. Боруцкий П. Н. Каталитические процессы получения углеводородов разветвленного строения : изомерия и катализ синтеза углеводородов разветвленного строения [Текст] / П. Н. Боруцкий. - СПб. : Профессional, 2010. - 726 с.
4. Введенский, Вадим Юрьевич. Экспериментальные методы физического материаловедения [Текст] / В. Ю. Введенский, А. С. Лилеев, А. С. Перминов ; Национальный исследовательский

- технологический университет "МИСиС". - Москва : МИСИС, 2011. - 309 с.
5. Вигдорович В. И. Электрохимическое и коррозионное поведение металлов в кислых спиртовых и водно-спиртовых средах / В. И. Вигдорович, Л. Е. Цыганова. - М. : Радиотехника, 2009. - 327 с.
  6. Гордадзе, Гурам Николаевич. Углеводороды нефти и их анализ методом газовой хроматографии [Текст] / Г. Н. Гордадзе, М. В. Гируц, В. Н. Кошелев; Рос. гос. ун-т нефти и газа им. И. М. Губкина. - Москва : МАКС Пресс, 2010. - 234 с.
  7. Грибов Л. А. Элементы квантовой теории строения и свойств молекул [Текст]/ Л. А. Грибов. - Долгопрудный : Интеллект, 2010. - 310 с.
  8. Де Векки, Андрей Васильевич. Катализ. Теория и практика [Текст]/ А. В. Де Векки. - СПб. : НПО "Профессионал", 2010. - 501 с.
  9. Иванов-Шиц, Алексей Кириллович. Ионика твердого тела : В 2-х томах. Т. 2 [Текст] / А.К. Иванов-Шиц, И.В. Мурин ; Санкт-Петерб. гос. ун-т, Рос. акад. наук, Ин-т кристаллографии. - СПб. : Изд-во С.-Петербур. ун-та, 2010. - 999 с.
  10. Игнатов С.К. Квантово-химическое моделирование молекулярной структуры, физико-химических свойств и реакционной способности. (Часть 1. Обзор современных методов электронной структуры и теории функционала плотности). [Текст] / С.К. Игнатов; Федер. агентство по образованию, Нижегородский государственный ун-т, - Нижний Новгород, 2006, - 82 с.
  11. Игнатов С.К. Квантово-химическое моделирование молекулярной структуры, физико-химических свойств и реакционной способности. (Часть 2. Оптимизация геометрии и расчет физико-химических свойств). [Текст] / С.К. Игнатов; Федер. агентство по образованию, Нижегородский государственный ун-т, - Нижний Новгород, 2010, - 80 с.
  12. Кокотов, Юрий Абрамович. Химический потенциал [Текст] / Ю. А. Кокотов Санкт-Петербург : Нестор-История, 2010. - 412 с.
  13. Лилич Л. С. Растворы как химические системы : донорно-акцепторные реакции в растворах [Текст] / Л. С. Лилич, М. К. Хрипун ; Санкт-Петербургский государственный университет. - 2-е изд. - СПб. : Изд-во С.-Петербур. ун-та, 2010. - 251 с.
  14. Соболев, Владимир Андреевич. Редукция моделей и критические явления в макрокинетике [Текст] / В. А. Соболев, Е. А. Щепакينا. - Москва : Физматлит, 2010. - 319 с.
  15. Титце Л. Ф. Домино-реакции в органическом синтезе [Текст] /Л. Ф. Титце, Г. Браше, К. М. Герике. - Москва : Бином. Лаборатория знаний, 2010. - 671 с.
  16. Фенелонов, Владимир Борисович. Адсорбционно-капиллярные явления и пористая структура катализаторов [Текст] / В. Б. Фенелонов, М. С. Мельгунов ; Федер. агентство по образованию, Новосиб. гос. ун-т, Фак. естеств. наук. - Новосибирск : НГУ, 2010. - 188 с.

17. Ярославцев А. Б. Химия твердого тела / А. Б. Ярославцев. - М. : Научный мир, 2009. - 327 с.

### 5.3 Интернет ресурсы

1. Scopus, база данных рефератов и цитирования, <http://www.scopus.com>.
2. ScienceDirect (Elsevier), база данных научного цитирования, естественные науки, техника, медицина и общественные науки, <http://www.sciencedirect.com>.
3. Web of Science Core Collection – международная междисциплинарная база данных научного цитирования, <http://www.webofknowledge.com>.
4. Электронно-библиотечная система издательства «ЛАНЬ», <http://e.lanbook.com>.
5. Университетская библиотека ONLINE, электронно-библиотечная система, <http://biblioclub.ru/>.
6. Образовательная платформа - электронно-библиотечная система издательства «Юрайт», <https://urait.ru/>.
7. Электронно-библиотечная система Znanium.com, <http://www.znaniy.com>.
8. Центральная Научная Библиотека имени Н.И. Железнова, <http://www.library.timacad.ru>.
9. United Nations Environment Program: [www.unep.org](http://www.unep.org).
10. eLIBRARY.RU Научная электронная библиотека, <http://elibrary.ru/>.
11. Национальная электронная библиотека, <https://rusneb.ru/>.
12. Электронная библиотека IOP Science дома научного контента от IOP Publishing, <http://iopscience.iop.org/>.
13. Электронная библиотека SPIE. Digital library, <http://spiedigitallibrary.org/>.
14. Архив научных журналов Министерства образования и науки Российской Федерации, <http://archive.neicon.ru/xmlui/>.
15. Библиотека издательства Annual Reviews, библиотека журналов <http://www.annualreviews.org>.
16. Библиотека Российского фонда фундаментальных исследований, <http://www.rfbr.ru/rffi/ru/library>.
17. Центральная научная библиотека ФИЦ КНЦ СО РАН, <http://cnb.krasn.ru>.
18. Электронная библиотека Nature, <http://www.nature.com>.
19. Электронная библиотека Science, <http://www.sciencemag.org>.
20. База данных научного цитирования издательства Taylor&Francis Group, <http://www.tandfonline.com/>.
21. Онлайн-библиотека Wiley Online Library, <http://onlinelibrary.wiley.com>.
22. Электронная библиотека журналов открытого доступа ACS Publications, <http://pubs.acs.org/>.
23. Электронная библиотека журналов Американского физического общества APS physics, <http://publish.aps.org>.
24. Электронно-библиотечная система Scitation, издательство AIP Publishing Books, <http://scitation.aip.org/>.

25. Цифровой образовательный ресурс – электронная библиотечная система IPR SMART, <http://www.iprbookshop.ru/>.
26. Библиотека издательства Oxford Academic, <http://www.oxfordjournals.org>.
27. Справочная библиотека издательства Oxford University Press, цифровая платформа Oxford Reference, <http://www.oxfordreference.com>.
28. Электронная система исследовательских журналов мирового уровня открытого доступа SAGE journals, <http://online.sagepub.com/>.

Согласовано:

Заведующий кафедрой фундаментальных  
дисциплин и методологии науки



В.В. Минеев

Заведующий аспирантурой



Е.В. Нефедова

Декан факультета подготовки кадров



А.Н. Кокорин