

Приложение 9
УТВЕРЖДЕНО
приказом по ФИЦ КазНЦ РАН
25.04.2018 № 16-А

Разработано и рекомендовано к утверждению
Ученым советом ИОФХ им. А.Е. Арбузова –
обособленного структурного подразделения
ФИЦ КазНЦ РАН
«18» апреля 2018 г., протокол № 5

ПРОГРАММА КАНДИДАТСКОГО ЭКЗАМЕНА

по дисциплине

«Физическая химия»

Уровень высшего образования
Подготовка кадров высшей квалификации
Направление подготовки

04.06.01 ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

Направленность подготовки:

Физическая химия (02.00.04)

Квалификация выпускника:

Исследователь. Преподаватель-исследователь

1. Введение

Кандидатский экзамен по дисциплине «Физическая химия» является формой промежуточной аттестации аспирантов, обучающихся по направлению 04.06.01 Химические науки, направленность подготовки Физическая химия.

В ходе экзамена оценивается степень овладения аспирантами следующих компетенций

1.1 Универсальные компетенции:

- способность 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);
- готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач (УК-3).

1.2 Общепрофессиональные компетенции:

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

1.3 Профессиональные компетенции:

- способность собирать и анализировать мировые научные знания о фундаментальных основах современной физической химии и формулировать направления самостоятельных исследований (ПК-1);
- владение основами современных методов экспериментальной физической химии (ПК-2);
- способность обобщать и анализировать полученные результаты и представлять их в виде научных публикаций (ПК-3);
- способность к выявлению и установлению закономерностей, определяющих строение веществ, направление и скорость химических превращений при различных внешних условиях; о количественных взаимодействиях между химическим составом, структурой вещества и его свойствами (ПК-4).

Настоящая программа разработана на основе программы, утвержденной Министерством образования и науки Российской Федерации (Приказ Минобрнауки РФ от 08.10.2007 № 274 «Об утверждении программ кандидатских экзаменов»).

В основу настоящей программы положены следующие дисциплины: учение о строении вещества, химическая термодинамика, теория поверхностных явлений, учение об электрохимических процессах, теория кинетики химических реакций и учение о катализе.

Кандидатский экзамен по физической химии проводится в устной форме по вопросам программы, на экзамене предлагается три вопроса (без билетов). После устного ответа могут заданы дополнительные и уточняющие вопросы, не выходящие за пределы программы кандидатского экзамена.

2. Программа 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, σ - и π -орбитали. π -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.

II. 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 μ -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, теплоемкости 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 – Эммета – 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.

III. 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. Коллельные 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 (поступа-

тельной, 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 РРKM. 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.

Электрокапиллярные 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.

3. Рекомендуемая литература

Основная литература

1. Бейдер Р. Атомы в молекулах: Квантовая теория. - М.: Мир, 2001. - 532 с.
2. Бердетт Дж. Химическая связь / Пер. с англ. - М.: БИНОМ. Лаб. знаний, 2008. - 245 с. (+ 1 экз. издание 2012 г.)
3. Горшков, В.И. Основы физической химии: учеб./ В.И. Горшков, И.А. Кузнецов. – 4-е изд. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011. – 407 с.
4. Грибов, Л.А. Элементы квантовой теории строения и свойств молекул: учебное пособие / Л.А. Грибов. – Долгопрудный: Интеллект, 2010. – 310 с.
5. Дамаскин Б.Б., Петрий О.А., Цирлина Г.А. Электрохимия. - Москва, Химия, 2006. 670 с. (+ 1 экз. издание 2008 г.)
6. Крылов О.В. Гетерогенный катализ: Учебное пособие. М: Академкнига, 2004. – 679 с.
7. Миомандр Ф. и др. Электрохимия. - М.: Техносфера, 2008. - 360 с. (2 экз.)
8. Пентин Ю.А., Вилков Н.В. Физические методы исследования в химии – М.: Мир, 2012. – 683 с. (+ 1 экз. издание 2009 г.; + 1 экз. издание 2003 г.)
9. Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. М.: Мир, 2002. – 461 с.
10. Романовский Б.В. Основы химической кинетики: учебник. – М.: Издательство «Экзамен», 2006. -415 с.
11. Сумм Б.Д. Основы коллоидной химии: Учебное пособие. - М.: Академия, 2006. - 238 с. (+ 1 экз. издание 2013 г.)
12. Темкин О.Н. Гомогенный металлокомплексный катализ. Кинетические аспекты / О.Н.Темкин. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2008. – 918 с.
13. Уманский, С.Я. Теория элементарных химических реакций / С.Я. Уманский. – Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2009. – 408 с.
14. Физическая и коллоидная химия: Учебник / ред. А.П. Беляев. – М.: ГЭОТАР-Медиа, 2010. – 700 с.: ил., табл.
15. Цирельсон, Владимир Григорьевич. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Текст] : учебное пособие / В. Г. Цирельсон, 2014. – 495 с. (+1 экз. издание 2010 г.)
16. Чоркендорф, И. Современный катализ и химическая кинетика / И. Чонкердорф, Х.Наймантсведрайт. – Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2010. – 504 с.
17. Щеголев, И.Ф. Элементы статистической механики, термодинамики и кинетики: учебное пособие / И.Ф. Щеголев. – 2-е изд., испр. – Долгопрудный: Интеллект, 2010. – 208 с.
18. Ягодковский В.Д. Статистическая термодинамика в физической химии. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2005. – 495 с.

Дополнительная литература

1. Freemantle, M. An Introduction to Ionic Liquids / M. Freemantle. – RSC Publishing, 2010. – 281 p.
2. Hartwig, John F. Organotransition Metal Chemistry: from bonding to catalysis / J.F. Hartwig. – Mill Valley: University Science Books, 2010. – 1127 p.
3. Jonasz, M. Light Scattering by Particles in Water. Theoretical and Experimental Foundations / M. Jonasz, G.R. Fournier. – Elsevier, 2004. – 704 p.

4. Lukas, H. Computational Thermodynamics: The Calphad Method / H. Lukas, S.G. Fries, V. Sundman. – Cambridge University Press, 2007. – 313 p.
5. Адамсон А. Физическая химия поверхностей. М.: Мир, 1979. – 568 с.
6. Бажин Н.М. и др. Термодинамика для химиков: Учебник для вузов / М.: Химия, 2001. – 408 с.
7. Байрамов В.М. Основы электрохимии: Уч. пособие. - М.: Изд. центр "Академия", 2005. - 240 с.
8. Беккер Г. Введение в электронную теорию органических реакций. - М.: Мир, 1977. - 658 с.
9. Боресков Г.К. Гетерогенный катализ. М.: Наука, 1986. – 303 с.
10. Вершинин В.И. Компьютерная идентификация органических соединений. – М.: Академкнига, 2002. – 197 с.
11. Воронин, А.И. и др. Динамика молекулярных реакций.. - М.: Наука, 1990. - 420 с.
12. Из истории катализа: люди, события, школы: сборник / Кальнер В.Д. - М.: Калвис, 2005. - 568 с.
13. Кругляков, П.М. Физическая и коллоидная химия / П.М. Кругляков, Т.Н. Хаскова. – 2-е изд., испр. – М.: Высш. шк., 2007. – 319 с.: ил.
14. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. М.: Химия. 1986. – 246 с.
15. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул (Электронные оболочки). М.: Высш. Школа, 1979. – 467 с.
16. Мюнстер А. и др. Химическая термодинамика / Пер. с нем. Агеев Е.П. - М.: УРСС, 2002. - 295 с. (+1 экз. издание 2010 г.)
17. Накамура А., Цуцуи М. Принципы и применение гомогенного катализа. М.: Химия, 1983. – 231 с.
18. Панченков Г.М., Лебедев В.П. Химическая кинетика и катализ. М.: Химия, 1985. – 590 с.
19. Ролдугин, В.И. Физикохимия поверхности: Учебник-монография / В.И. Ролдугин. – Долгопрудный: Издательский дом «Интеллект», 2008. – 568 с. (2 экз.)
20. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия: М.: Высш. шк., 1988. – 496 с.
21. Тоуб, М. Механизмы неорганических реакций: пер.с англ. / М. Тоуб, Дж. Берджесс; под ред. А.А. Дроздова. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. – 678 с.: ил.
22. Умрихин В.А. Физическая химия: Учебное пособие. - М.: КДУ, 2009. - 232 с.
23. Френкель, Даан. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем. От алгоритмов к приложениям [Текст] : монография / Д. Френкель, Б. Смит; пер. с англ. и науч. ред. рус.изд. В. А. Иванов, М. Р. Стукан, 2013. - 559 с.
24. Хельтье Х.-Д. И др. Молекулярное моделирование. Теория и практика. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. – 318 с. (+1 экз. издание 2013 г.)
25. Хенрици-Оливэ Г., Оливэ С. Координация и катализ. М.: Мир, 1980. – 421 с.
26. Эмануэль Н. М., Кнорре Д. Г. Курс химической кинетики. М.: Высшая школа. 1984. – 463 с.
27. Эткинс П. Физическая химия. В 2-х т. - М.: Мир, 1980.

Электронные ресурсы

Электронная платформа издательства American Chemical Society -
<http://www.pubs.acs.org>

Электронная платформа издательства Taylor&Francis -
<http://www.informaworld.com>

Электронная платформа издательства - [http:// www.scitation.aip.org](http://www.scitation.aip.org) (13 журналов)

Электронная платформа издательства Royal Society of Chemistry -
<http://www.rsc.org>

Электронная платформа издательства WILEY-BLACWALL -
<http://www.interscience.wiley.com> (более 2000 журналов)

Электронная платформа издательства SPRINGER - <http://www.springerlink.com>
 (более 2000 журналов)

Платформа научной электронной библиотеки e-Library.ru -
<http://www.elibrary.ru> (более 8000 журналов)

Электронная платформа издательства Elsevier - <http://www.sciencedirect.com>
 (более 300 журналов)

Электронная платформа издательства Elsevier - <http://www.scopus.com> (Реферативно-поисковая база данных Scopus)

4. Критерии оценки

Отлично	<ul style="list-style-type: none"> – Все вопросы раскрыты полностью; – Обучающийся владеет основными теориями и глубоко понимает их содержание; – Имеет ясное представление связи теории и практики в рамках излагаемого материала; – Уверенно владеет необходимыми методами решения конкретных задач, может проиллюстрировать основные положения теории конкретными примерами; – Ясно и четко дает основные определения. Владеет терминологическим и понятийным аппаратом; – Развернуто отвечает на дополнительные вопросы.
Хорошо	<ul style="list-style-type: none"> – Вопросы раскрыты по существу; – Обучающийся в целом владеет основными теориями и понимает их содержание; – Имеет общее представление о связи теории и практики в рамках излагаемого материала; – Владеет в целом необходимыми методами решения конкретных задач, может проиллюстрировать основные положения теории конкретными примерами; – В достаточной мере владеет понятийным и терминологическим аппаратом; – Имеет затруднения при ответе на дополнительные вопросы.

Удовлетворительно	<ul style="list-style-type: none">– Вопросы раскрыты, но не полностью;– Слабое понимание связи теории и практики;– Обучающийся может проиллюстрировать основные положения теории конкретными примерами, но имеет затруднения при решении некоторых задач;– Обучающийся не демонстрирует уверенного владения понятийным и терминологическим аппаратом;– Дополнительные вопросы вызывают затруднение.
Неудовлетворительно	<ul style="list-style-type: none">– Большая часть вопросов не раскрыта;– Обучающийся не может проиллюстрировать основные положения теории конкретными примерами, не может применить теорию при решении конкретных задач;– Нет ответов на дополнительные вопросы.