

**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Объединенный институт высоких температур  
Российской академии наук**

Принято на Ученом совете  
ОИВТ РАН  
Протокол № 5 от 21.06.2022

**«Утверждаю»**

**Директор ОИВТ РАН**



академик Петров О.Ф.

« 21 »

2022 год



**ПРОГРАММА-МИНИМУМ**

кандидатского экзамена по специальности

**1.4.4 «Физическая химия»**

по химическим, техническим и физико-математическим наукам

Направление подготовки «Химические науки» 04.06.01

Москва  
2022 год

## Введение

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

Программа составлена на основе паспорта соответствующей научной специальности номенклатуры научных специальностей, по которым присуждаются ученые степени, утвержденной приказом Министерства науки и высшего образования РФ от 24 февраля 2021г. №118.

### **1. Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений, а также их спектральных характеристик.**

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

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.

Строение молекул простых и координационных неорганических соединений. Полиядерные комплексные соединения. Строение основных типов органических и элементоорганических соединений. Соединения включения. Полимеры и биополимеры.

**2. Экспериментальное определение термодинамических свойств веществ, расчет термодинамических функций простых и сложных систем, в том числе на основе методов статистической термодинамики, изучение термодинамических аспектов фазовых превращений и фазовых переходов.**

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.

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.

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.

Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые  $\Gamma$ - 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 «гармонический осциллятор – жесткий ротатор». 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.

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 состояний 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.

Термодинамические функции. Общие критерии термодинамической устойчивости.

**3. Определение термодинамических характеристик процессов на поверхности, установление закономерностей адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях.**

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.).

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).

Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей, структура границы раздела конденсированных фаз. Молекулы и кластеры на поверхности. Структура адсорбционных слоев.

**4. Теория растворов, межмолекулярные и межчастичные взаимодействия. Компьютерное моделирование строения, свойств и спектральных характеристик молекул и их комплексов в простых и непростых жидкостях, а также ранних стадий процессов растворения и зародышеобразования.**

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

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.

**5. Изучение физико-химических свойств изолированных молекул и молекулярных соединений при воздействии на них внешних электромагнитных полей, потока заряженных частиц, а также экстремально высоких/низких температурах и давлениях.**

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. 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.

Методы экспериментально определения дипольных моментов молекул. Определение дипольных моментов молекул, находящихся в парообразной фазе. Определение дипольных моментов молекул в разбавленных растворах.

Спектральные методы исследования структур молекул. Спектральные и физико-химические помехи. Способы их устранения.

Методы электронной спектроскопии. Электронная абсорбционная спектроскопия (УФ-ВИД спектроскопия). Электронные спектры поглощения органических соединений. Электронные спектры поглощения комплексных



соединений. Применение электронной абсорбционной спектроскопии для определения содержания веществ в растворах, термодинамических и кинетических характеристик равновесных процессов. Методы люминесцентной спектроскопии (эмиссионные методы). Люминесцентный анализ.

Методы колебательной спектроскопии. ИК спектроскопия. Интерпретация ИК спектров. Применение ИК спектроскопии в количественном анализе. Спектроскопия комбинационного рассеяния.

Спектроскопия ядерного магнитного резонанса. Спектры высокого разрешения. Регистрация ПМР спектров.

Масс-спектрометрия. Способы ввода образцов в ионизационную камеру масс-спектрометра. Способы ионизации веществ. Классификация ионов, образующихся в ионизационной камере масс-спектрометра. Направления фрагментации частиц.

## **6. Химические превращения, потоки массы, энергии и энтропии пространственных и временных структур в неравновесных системах.**

Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные, стационарные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, интенсивные и экстенсивные переменные. Термические и калорические уравнения состояния. Теорема о соответственных состояниях.

Уравнение состояния Ван-дер-ваальса. Уравнения состояния кубического типа. Вириальные уравнения состояния. Фундаментальные уравнения состояния.

Постулаты термодинамики неравновесных процессов. Скорость возникновения энтропии. Функция диссипации. Средство по Де Донде. Возрастание энтропии в закрытых системах как результат химических

реакций, теплопередачи, диффузии. Возникновение энтропии в открытых системах. Баланс энтропии. Уравнение Онсагера. Принцип Кюри.

Применения методов термодинамики неравновесных процессов. Релаксационные процессы. Устойчивость равновесия к флуктуациям. Стационарные состояния в непрерывных системах. Теорема Гленсдорфа-Пригожина.

Термодинамика систем, далеких от равновесия. Самоорганизация в открытых системах. Критерий устойчивости стационарного состояния. Потеря устойчивости, бифуркация, катастрофа.

Методы расчета изменения энтропии при в неравновесных процессах. Изменение энтропии при химической реакции.

## **7. Макрокинетика, механизмы сложных химических процессов, физико-химическая гидродинамика, растворение и кристаллизация.**

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

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

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.

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

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.

Фазовые переходы первого рода. Растворение и кристаллизация.

**8. Динамика элементарного акта химических реакций. Механизмы реакции с участием активных частиц.**

Механизм химической реакции. Частицы, участвующие в химической реакции. Классификация химических реакций. Элементарная химическая реакция. Скорость химической реакции. Зависимость скорости химической

реакции от концентрации реагирующих веществ. Константа скорости химической реакции.

Формальная кинетика гомогенных реакций. Кинетические уравнения реакций. Зависимость скорости реакции от температуры. Определение кинетических параметров реакции.

Цепной механизм химической реакции. Индуцированные реакции. Фотохимические реакции. Радиационно–химические процессы.

Макрокинетика. Гетерогенные реакции. Горение и взрыв. Катализ. Гомогенный катализ. Гетерогенный катализ.

## **9. Связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями протекания химической реакции.**

Термодинамические и кинетические условия протекания реакций. Интермедиаты реакций. Интермедиаты, образующиеся при гетеролитическом разрыве химической связи. Интермедиаты, образующиеся при гомолитическом разрыве химической связи. Одноэлектронный перенос.

Строение и реакционная способность ковалентных соединений. Предсказание геометрической формы молекул. Молекулы без не поделённых пар электронов. Молекулы с не поделёнными парами электронов. Правила предсказания геометрического строения молекул по Гиллеспи.

Гибридизация атомных орбиталей и реальное строение молекул. Эквивалентность гибридных орбиталей. Энергетика гибридизации. Изогнутые связи. Длина связей. Экспериментальные методы определения строения веществ.

Атомная инверсия. Псевдовращение по Берри. Нуклеофильное замещение. Радикальные реакции.

Комплексы с координационными числами 2 и 3. Комплексы с координационным числом 4. Тетраэдрические комплексы. Плоскоквадратные комплексы.

Реакции замещения в плоскоквадратных комплексах. Закономерность трансвлияния. Реакции замещения в октаэдрических комплексах.

Окислительно-восстановительные реакции. Фотохимические реакции.

**10. Создание и разработка методов компьютерного моделирования строения и механизмов превращений химических соединений на основе представлений квантовой механики, различных топологических и статистических методов, включая методы машинного обучения, методов молекулярной механики и молекулярной динамики, а также подходов типа структура-свойства.**

Моделирование как метод научного познания. Принципы системного подхода в моделировании систем. Основные подходы к построению математических моделей систем. Методика разработки и компьютерной реализации моделей систем. Инструментальные средства моделирования. Роль баз данных при моделировании. Обработка результатов моделирования. Методы математического описания динамики взаимодействующих частиц. Квантовохимические расчеты «из первых принципов». Полуэмпирические методы. Атомистические подходы. Методы Монте-Карло. Основы параллельных вычислений.

Модели кластерных систем. Модели атомной подвижности. Структурные модели кластера. Фрактальные кластеры.

Математические модели транспортно-диффузионного переноса. Модель заряжения материалов. Модель транспорта электронов. Модель диффузии.

Машинное обучение. Место искусственного интеллекта в химии и материаловедении. Химические данные. Способы хранения химической информации. Нейронные сети.

Методы представления структур твердого тела. Методы оптимизации гиперпараметров. Методы глобальной оптимизации. Предсказание модели в материаловедении. Генеративные модели в химии и материаловедении.

**11. Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, реакционной способности и динамике превращений химических соединений, находящихся в различном окружении, в том числе в кластерах, клатратах, твердых и жидкокристаллических матрицах, в полостях конденсированных среды и белковом окружении.**

Постулаты квантовой механики. Решение уравнения Шредингера для атома водорода. Метод самосогласованного поля. Атомные орбитали. Принцип Паули и структура многоэлектронной волновой функции. Одноэлектронные уравнения в многоэлектронной теории. Электронная структура и свойства многоэлектронных атомов.

Решение молекулярного уравнения Шредингера. Вариационный метод. Метод Хартри-Фока. Выбор базисного набора, уравнение Рутаана-Холла. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока. Корреляционные методы. Базисные наборы. Классификация базисных наборов. Анализ волновой функции. Локализованные орбитали.

Взаимодействия в молекулах. Химическая связь. Силовой и энергетический аспекты описания химической связи. Орбитальная картина химической связи. Пространственное распределение электронной плотности. Силы в молекулах. Распределение энергии в молекулах. Дырка Ферми как характеристика химической связи. Многоатомные молекулы. Характеристики молекул, зависящие от распределения заряда.

Невалентные взаимодействия в молекулярных системах. Квантово-химический анализ межмолекулярных взаимодействий. Донорно-

акцепторные молекулярные комплексы. Водородная связь. Гибридные методы квантовой механики.

Электронное строение твердых тел. Одноэлектронные волновые функции в бесконечных периодических кристаллах. Методы расчета волновых функций в кристаллах. Электронное строение полимеров.

Теория функционала плотности. Типы функционалов (LDA, GGA и гибридные). Преимущества и недостатки методов ТФП.

## **12. Физико-химические основы процессов химической технологии и синтеза новых материалов.**

Эксергетический анализ. Потери эксергии в простых технологических операциях, при теплообмене, смешении газов, при газофазной реакции. Потери эксергии в технологиях получения водорода.

Локальные уравнения движения гомогенных сред. Движение идеальной жидкости. Уравнение Эйлера, интеграл Бернулли и уравнение Лапласа. Струйные течения. Волновые течения в идеальной несжимаемой жидкости. Эффекты, обусловленные сжимаемостью идеальной жидкости.

Распространение малых возмущений, звуковая волна. Распространение конечных возмущений. Ударная волна в химически инертном газе. Адиабата Гюгонио. Основные закономерности движения вязкой жидкости.

Уравнение Навье-Стокса. Гидродинамический пограничный слой. Задача Блазиуса. Турбулизация пограничного слоя. Турбулентность. Свойства турбулентных потоков. Фильтрация. Диффузионные модели в химической технологии. Математические модели движения многокомпонентной жидкости. Уравнение конвективной диффузии.

Принципы макрокинетического анализа. Структурные неоднородности в системах с химическими и фазовыми превращениями. Макрокинетика процессов в гомогенных системах с химическими превращениями.

Макрокинетика процессов в гетерогенных системах с химическими превращениями.

Диффузионный пограничный слой. Массоперенос между твердым телом и покоящейся жидкостью. Массоперенос между твердым телом и потоком вязкой жидкости. Задача Левича. Макрокинетический анализ задачи о теплообмене между потоком теплоносителя и твердой поверхностью.

Макрокинетика процессов горения в гомогенных средах. Диффузионное горение. Медленное горение. Фронт пламени. Быстрое горение. Детонационная волна.

Понятие химического реактора. Показатели эффективности химического реактора. Параметры реактора. Классификация химических реакторов. Режимы работы реактора. Масштабирование химических реакторов. Требования к конструкции реактора. Промышленные реакторы. Формальные модели химических реакторов и теплообменных аппаратов.

Математические модели структуры потоков в химических реакторах. Масштабный эффект и продольная дисперсия в химических аппаратах. Принципы описания тепло- и массообменных процессов в химической технологии. Математические модели теплообменных и массообменных аппаратов.

Элементарные понятия материаловедения. Элементы теории упругости. Деформации в твердом теле. Напряжения в твердом теле. Свободная энергия деформируемого тела. Прочность твердых тел. Энергетическая теория разрушения Гриффитса. Кинетическая теория разрушения. Критерии прочности. Углеродные материалы со структурой графита. Композиционные материалы.



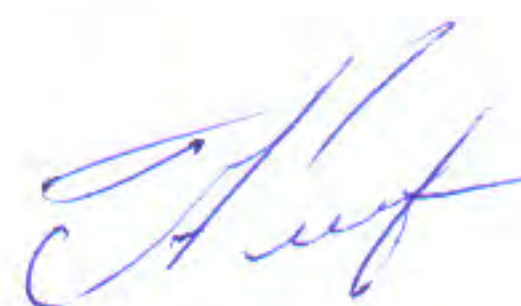
## Литература

- Вилков Л. В., Пентин Ю. А. Физические методы исследования в химии. М.: Изд-во МГУ. Ч. 1. 1987. Ч. 2. 1989.
- Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Теория строения молекул. Ростов-Дон: Феникс. 1997.
- Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, Изд-во МГУ. 2001.
- Фларри Р. Квантовая химия. М.: Мир. 1985.
- Бейдер Р. Атомы в молекулах. М.: Мир. 2001
- Цирельсон В. Г., Зоркий П. М. Распределение электронной плотности в кристаллах органических соединений. Итоги науки и техники. Кристаллохимия. М.: ВИНТИ. 1986.
- Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. М.: Химия. 1986.
- Полторак О. М. Термодинамика в физической химии. М.: Высшая школа. 1991
- Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. М.: Мир. 2002
- Смирнова Н. А. Методы статистической термодинамики в физической химии. М.: Высшая школа. 1982.
- Агеев Е. П. Неравновесная термодинамика в вопросах и ответах. М.: Химический ф-т МГУ. 1999.
- Адамсон А. Физическая химия поверхностей. М.: Мир. 1979.
- Дамаскин Б. Б., Петрий О. А., Цирлина Г. А. Электрохимия. М.: Химия. 2001. 624 с.
- Даниэльс Ф. Олберти Р. Физическая химия. М.: Мир. 1978.
- Дуров В. А., Агеев Е. П. Термодинамическая теория растворов неэлектролитов. М.: Изд-во МГУ. 1987.
- Хаазе Р. Термодинамика необратимых процессов М.: Мир. 1967.
- Эткинс Н. Физическая химия. Т. 1 и 2. М.: Мир. 1980. (В 2002 г. выйдет новое издание данного учебника в 3-х томах)

- Дамаскин Б. Б., Петрий О. А. Введение в электрохимическую кинетику. М.: Высшая школа. 1983.
- Денисов Е. Т., Саркисов О. М., Лихтенштейн Г. И. Химическая кинетика. М.: Химия. 2000.
- Эмануэль Н. М., Кнорре Д. Г. Курс химической кинетики. М.: Высшая школа. 1984.
- Панченков Г. М., Лебедев В. П. Химическая кинетика и катализ. М.: Химия. 1985.
- С.Г. Лисицын. Компьютерное моделирование задач молекулярной физики. – Доглопрудный: Интеллект, 2019. – 142 с.
- Б.Н. Галимзянов, А.В. Мокшин Основы моделирования молекулярной динамики: учебное пособие. – Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2018. – 106 с.
- Р. Роберт, З. Джулиана. Параллельные и высокопроизводительные вычисления. – М.: ДМК Пресс, 2022. – 800 с.
- А.А. Малявко. Параллельное программирование на основе технологий OpenMP, CUDA, OpenCL, MPI. – 2-е изд., испр. и доп. – М.: Юрайт, 2022. – 136 с.
- С.А. Лупин, М.А. Посыпкин. Технологии параллельного программирования: учебное пособие. – М.: Форум, 2020. – 206 с.
- В.П. Гергель, А.В. Сысоев. Высокопроизводительные параллельные вычисления: 100 заданий для расширенного лабораторного практикума. – М.: Физматлит, 2018. – 248 с.
- С.В. Борзунов, С.Д. Кургалин, А.В. Флегель. Практикум по параллельному программированию. – С.-Петербург: БХВ-Петербург, 2017. – 236 с.
- Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика в 10 т. – 6-е изд., испр. – М.: Физматлит, 2021. – Т. 5. Статистическая физика, Ч.1. – 620 с.

СОГЛАСОВАНО:

Ученый секретарь ОИВТ РАН, д.ф.-м.н.



Амиров Р.Х.

Заведующая аспирантурой, к.ф.-м.н.



Мартынова И.А.