

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего
образования
«Южно-Уральский государственный университет
(национальный исследовательский университет)»

«УТВЕРЖДАЮ»

Ректор

А.Л. Шестаков

«___» 20 ___ г.

ПРОГРАММА

вступительного испытания в аспирантуру по направлению подготовки

04.06.01 – Химические науки

(направленности: 02.00.03 – Органическая химия, 02.00.04 – Физическая
химия, 02.00.08 – Химия элементоорганических соединений)

Челябинск

1 Структура вступительного испытания

Вступительное испытание по специальной дисциплине состоит из двух частей: экзамена по специальной дисциплине (оценивается по 25-балльной шкале), и собеседования по тематике предполагаемого диссертационного исследования (оценивается по 25-балльной шкале).

2 Требования к абитуриенту

Программа вступительного испытания сформирована на основе ФГОС ВО магистратуры и/или специалитета по соответствующим направлениям/специальностям.

3 Процедура проведения вступительного испытания

Экзамен по специальной дисциплине принимается устно по билетам. Каждый билет содержит 2 вопроса. Собеседование по тематике предполагаемого диссертационного исследования проводится на основе подготовленного поступающим реферата.

4 Содержание вступительного испытания

4.1 Содержание экзамена по специальной дисциплине

Направленность 02.00.03 – Органическая химия

1. Электронные представления о природе связей. Типы связей в органической химии. Гибридизация атомов углерода и азота. Электронные эффекты. Электроотрицательность атомов и групп.
2. Основные положения квантовой химии. Атомные и молекулярные орбитали. Приближение МО-ЛКАО. Метод МО Хюккеля и более строгие квантово-химические методы расчета. Понятие о полуэмпирических методах, основанных на приближении Хартри–Фока.
3. Понятие о резонансе (сопряжении) в классической и квантовой химии. Сопряжение в методе МО Хюккеля. Концепция ароматичности. Правило Хюккеля. Мезоионные соединения. Антиароматичность.
4. Понятие о конформации молекулы. Вращение вокруг связей: величины и симметрия потенциальных барьеров. Факторы, определяющие энергию конформеров. Влияние эффектов сопряжения на стабильность конформеров.
5. Номенклатура конформеров. Угловое напряжение и другие типы напряжения в циклических системах. Средние циклы и трансаннулярные взаимодействия. Инверсия циклов и азотсодержащих соединений.
6. Энантиомерия. Асимметрия и хиральность. Эквивалентные, энантиотопные и диастереотопные группы; их проявление в химическом поведении молекул в хиральных и ахиральных средах и спектрах ЯМР. Номенклатура оптических антипидов. Неуглеродные атомы как центры хиральности.
7. Способы получения и разделения энантиомеров. Оптическая чистота и методы ее определения. Определение абсолютной и относительной конфигурации. Понятие о дисперсии оптического вращения и круговом дихроизме.
8. Теория переходного состояния. Гиперповерхность потенциальной энергии, координата и энергетический профиль реакции. Термодинамические параметры активации.

Кинетические уравнения основных типов реакций. Методы экспериментального изучения кинетики и механизмов реакций. Постулат Хэммонда.

9. Эмпирический (экстратермодинамический) подход к реакционной способности. Корреляционные уравнения, принцип линейности свободных энергий Гиббса. Уравнения Гамметта и Тафта. Связь параметров корреляционных уравнений с механизмом реакций.

10. Принцип ЖМКО; его обоснование на основе теории возмущений МО.

10. Ассоциация ионов. Типы ионных пар и доказательства их существования. Влияние ассоциации ионов на их реакционную способность. Уравнение Акри.

11. Межфазный катализ. Краун-эфиры, криптанды, поданды, катализаторы межфазного переноса. Понятие о супрамолекулярной химии.

12. Карбениевые ионы (карбокатионы). Генерация карбокатионов в растворах и в газовой фазе. Влияние структурных и сольватационных факторов на стабильность карбокатионов. Строение карбокатионов. Понятие о неклассических ионах. Основные типы реакций карбокатионов и области их синтетического использования. Скелетные перегруппировки и гидридные сдвиги в карбокатионах.

13. Карбанионы и СН-кислоты. Влияние структурных и эффектов среды на стабилизацию карбанионов. Основные реакции карбанионов, анионные перегруппировки. Амбидентные и полидентные анионы.

14. Карбены. Электронная структура, синглетное и триплетное состояние карбенов. Методы генерации карбенов и использование их в органическом синтезе. Нитрены, их генерация, строение и свойства.

15. Свободные радикалы и ион-радикалы. Методы генерирования радикалов. Электронное строение и факторы стабилизации свободных радикалов. Типы стабильных свободных радикалов. Катион- и анионрадикалы. Методы генерирования и свойства. Основные реакции ион-радикалов. Комплексы с переносом заряда.

16. Нуклеофильное замещение в алифатическом ряду. Механизмы SN1 и SN2, смешанный ионно-парный механизм. Влияние структуры субстрата и полярности растворителя на скорости и механизм реакции.

17. Нуклеофильное замещение при кратной углерод-углеродной связи и в ароматическом ядре. Типичные механизмы нуклеофильного замещения у sp²-гибридного атома углерода. Моно- и бимолекулярные процессы нуклеофильного замещения в ароматическом ряду. Катализ переходными металлами.

18. Нуклеофильное замещение в нитропроизводных бензола. Нуклеофильное замещение водорода (викариозное замещение). Комpleксы Мейзенхаймера. Нуклеофильное замещение в ароматических гетероциклах. Кине-замещение.

19. Электрофильное замещение у атома углерода. Механизмы замещения SE1, SE2. Нуклеофильный катализ электрофильного замещения. Влияние структуры субстрата и эффектов среды на скорость и направление реакций. Замещение у олефинового атома углерода и в ароматическом кольце. Генерирование электрофильных реагентов. Правила ориентации и их молекулярно-орбитальная интерпретация. Электрофильное замещение других групп, кроме водорода. Кинетические изотопные эффекты.

20. Реакции элиминирования (отщепления). Механизмы гетеролитического элиминирования E1 и E2. Стереоэлектронные требования и стереоспецифичность при E2-элиминировании. Термическое син-элиминирование.
21. Электрофильное присоединение. Сильные и слабые электрофилы, механизм и стереохимия присоединения, регио- и стереоселективность реакций. Присоединение к сопряженным системам. Катионная полимеризация олефинов.
22. Нуклеофильное присоединение по кратным связям C–C. Механизм процесса. Влияние структуры нуклеофила и субстрата и эффектов среды на скорость и направление реакции. Реакция Михаэля. Анионная полимеризация олефинов.
23. Нуклеофильное присоединение к карбонильной группе: присоединение оснований, включая карбанионы, металлогорганических соединений. Реакция Анри. Кислотный и основной катализ присоединения.
24. Енолизация альдегидов и кетонов. Механизм этерификации кислот и получение ацеталей. Конденсации карбонильных соединений, карбоновых кислот и их производных. Нуклеофильное присоединение к альд- и кетиминам и карбоний- иммониевым ионам (реакция Манниха).
25. Перегруппировки в карбокатионных интермедиатах. Классификация перегруппировок: пинаколиновая и ретропинаколиновая, перегруппировка Демьянова. Перегруппировка Вагнера-Мейервейна. Перегруппировки с миграцией к атому азота (Гофмана, Курциуса, Бекмана). Реакция Байера–Виллигера.
26. Согласованные реакции. Концепция сохранения орбитальной симметрии и правила Вудворда-Гофмана. Электроциклические реакции, сигматропные перегруппировки. Перициклические реакции (2+2)- и (2+4)-циклоприсоединения. 1,3-диполярное циклоприсоединение.
27. Двойственная реакционная способность и таутомерия органических соединений. Прототропные и сигматропные перегруппировки. Правило Корнблюма. Кетоенольное равновесие.
28. Нитросоединения и нитроновые кислоты, нитрозосоединения и оксимы. Металлотропия.
29. Выбор оптимального пути синтеза. Принцип ретросинтетического анализа. Линейные и конвергентные схемы синтеза. Синтоны и синтетические эквиваленты. Защита функциональных групп. Методы введения и удаления защитных групп.
30. Основные пути построения углеродного скелета.
31. Методы введения важнейших функциональных групп и пути перехода от одних функций к другим.
32. Элементоорганические соединения (производные фосфора, бора, кремния, меди, лития, магния, олова) в органическом синтезе. Металлокомплексный катализ.
33. Использование химических и физико-химических методов для установления структуры органических соединений. Спектроскопия ЯМР, ЭПР, колебательная и электронная спектроскопия, масс- и хромато-масс-спектрометрия.
34. Газожидкостная и жидкостная хроматография, ионообменная и гель-проникающая хроматография, электрофорез. Рентгеноструктурный анализ и электронография.

35. Реакции алканов: галогенирование, сульфохлорирование. Селективность радикальных реакций и относительная стабильность алкильных радикалов. Термический и каталитический крекинг. Ионные реакции алканов в суперкислых средах (дейтероводородный обмен и галогенирование).

36. Циклоалканы. Методы синтеза и строение циклопропанов, циклобутанов, цикlopентанов и циклогексанов. Типы напряжения в циклоалканах и их подразделение на малые, средние и макроциклы. Конформационный анализ циклогексана,mono- и дизамещенных циклогексанов; аксиальные и экваториальные связи. Влияние конформационного положения функциональных групп на их реакционную способность в ряду производных циклогексана на примере реакций замещения, отщепления и окисления.

37. Методы синтеза алкенов: элиминирование галогеноводородов из алкилгалогенидов, воды из спиртов. Синтез алкенов из четвертичных аммониевых солей (Гофман), Нокисей третичных аминов (Коуп). Стереоселективное восстановление алкинов. Региоселективный синтез алкенов из тозилгидразонов (Шапиро). Реакция Виттига как региоспецифический метод синтеза алкенов. Основания, используемые в реакции. Стабилизированные и нестабилизированные илиды. Стереохимия реакции. Хемоселективность реакции Виттига. Получение эфиров алкилфосфоновых кислот (Михаэль–Арбузов) и их использование в синтезе алкенов (вариант Виттига–Хорнера–Эммонса). Область применения реакции.

38. Реакции алкенов: электрофильное присоединение галогенов, галогеноводородов, воды. Процессы, сопутствующие AdE-реакциям: сопряженное присоединение, гидридные и алкильные миграции.

39. Реакции алкенов: гидрокси- и алcoxимеркурирование. Регио- и стереоселективное присоединение гидридов бора. Региоспецифические гидроборирующие агенты. Окисление алкенов до оксиранов (Прилежаев).

40. Понятие об энантиомерном эпоксидировании алкенов по Шарплесу (в присутствии изопропилата титана и эфира L-(+)-винной кислоты). Цис-гидроксилирование алкенов по Вагнеру (KMnO_4) и Криге (OsO_4).

41. Радикальные реакции алкенов: присоединение бромистого водорода по Харашу, сероводорода и тиолов. Аллильное галогенирование по Циглеру. Присоединение синглетных и триплетных карбенов к алкенам. Карбеноиды, их взаимодействие с алкенами.

42. Методы синтеза алкинов: отщепление галогеноводородов из дигалогенидов, реакция 1,2-дигидразонов с оксидом ртути (II) и тетраацетатом свинца. Усложнение углеродного скелета алкинов: реакции ацетиленидов натрия и меди, магнийорганических производных алкинов. Конденсация алкинов-1 с кетонами и альдегидами (Фаворский, Реппе).

43. Реакции алкинов. Галогенирование, гидрогалогенирование, гидратация (Кучеров). Ацетилен-алленовая изомеризация. Смещение тройной связи в терминальное положение. Окислительная конденсация терминальных алкинов в присутствии солей меди.

44. Методы синтеза 1,3-диенов: дегидрирование алканов, синтез Фаворского–Реппе, кросс-сочетание на металлокомплексных катализаторах.

45. Реакции 1,3-диенов: галогенирование и гидрогалогенирование, 1,2- и 1,4-присоединение.

46. Реакция Дильса–Альдера с алкенами и алкинами, ее типы: карбо-реакция, гетерореакция. Диены и диенофилы. Стереохимия реакции. Региоселективность

[4+2]циклоприсоединения в случае несимметричных диенов и диенофилов. Ретро-реакция Дильса–Альдера.

47. Методы синтеза одноатомных спиртов: из алkenов, карбонильных соединений, сложных эфиров и карбоновых кислот.

48. Реакции одноатомных спиртов: замещение гидроксильной группы в спиртах на галоген (под действием галогеноводородов, галогенидов фосфора и хлористого тионила). Реагенты регио- и стереоселективного замещения (комплексы трифенилfosсина с галогенами и четыреххлористым углеродом). Дегидратация спиртов. Окисление первичных и вторичных спиртов. Реагенты окисления на основе соединений хрома (VI), диоксида марганца и диметилсульфоксида (методы Моффета и Сверна).

49. Методы синтеза и реакции двухатомных спиртов. Окислительное расщепление 1,2диолов (иодная кислота, тетраацетат свинца). Пинаколиновая перегруппировка.

50. Методы синтеза простых эфиров: реакция Вильямсона, алcoxимеркурирование спиртов. Реакции простых эфиров: образование оксониевых солей, расщепление кислотами.

51. Оксираны. Способы получения. Раскрытие оксиранового цикла под действием электрофильных и нуклеофильных агентов.

52. Методы получения альдегидов и кетонов: из спиртов, производных карбоновых кислот, алkenов (озонолиз), алкинов (гидроборирование), на основе металлорганических соединений. Ацилирование и формилирование аренов.

53. Реакции альдегидов и кетонов: присоединение воды, спиртов, тиолов. 1,3-Дитианы и их использование в органическом синтезе. Обращение полярности C=O-группы. Получение бисульфитных производных и циангидринов. Взаимодействие альдегидов и кетонов с илидами фосфора (Виттиг).

54. Взаимодействие альдегидов и кетонов с азотистыми основаниями. Перегруппировка Бекмана. Взаимодействие альдегидов и кетонов с металлорганическими соединениями.

55. Енамины, их алкилирование и ацилирование. Альдольно-кротоновая конденсация альдегидов и кетонов как метод усложнения углеродного скелета. Направленная альдольная конденсация разноименных альдегидов с использованием литиевых и кремниевых эфиров енолов. Конденсация альдегидов и кетонов с малоновым эфиrom и другими соединениями с активной метиленовой группой (Кневенагель).

56. Аминометилирование альдегидов и кетонов (Манних). Бензоиновая конденсация. Конденсация с нитроалканами (Анри). Восстановление альдегидов и кетонов до спиртов, реагенты восстановления. Дезоксигенирование альдегидов и кетонов: реакции Клемменсена и Кижнера–Вольфа. Окисление альдегидов, реагенты окисления. Окисление кетонов надкислотами по Байеру–Виллигеру.

57. Непредельные альдегиды и кетоны. Методы получения: конденсации, окисление аллиловых спиртов. Реакция 1,2- и 1,4-присоединения литийорганических соединений, триалкилборанов, диалкил- и диарилкупратов, цианистого водорода, галогеноводородов.

58. Методы синтеза кислот: окисление первичных спиртов и альдегидов, алkenов, алкинов, алкилбензолов, гидролиз нитрилов и других производных карбоновых кислот, синтез на основе металлорганических соединений, синтезы на основе малонового эфира.

59. Реакции карбоновых кислот: галогенирование по Гелю-Фольгардту-Зелинскому, пиролитическая кетонизация, электролиз по Кольбе, декарбоксилирование по Хунсдиккеру.

60. Методы получения производных карбоновых кислот: галогенангидридов, ангидридов, сложных эфиров, нитрилов, амидов. Кетены, их получение и свойства.

61. Реакции производных карбоновых кислот: взаимодействие с нуклеофильными реагентами (вода, спирты, аммиак, амины, металлорганические соединения). Восстановление галогенангидридов до альдегидов по Розенмунду и комплексными гидридами металлов. Восстановление сложных эфиров до спиртов и альдегидов, нитрилов – до аминов и альдегидов комплексными гидридами металлов.

62. Малоновая кислота: синтезы с малоновым эфиром, реакция Михаэля, конденсации с альдегидами (Кневенагель). Сложноэфирная и ацилоиновая конденсации. Особенности эфиров двухосновных кислот (образование карбоциклов) в этих реакциях. Ацетоуксусный эфир и его использование в синтезе.

63. Методы синтеза непредельных карбоновых кислот: дегидратация гидроксикислот, реакции Кневенагеля, Виттига, Перкина (синтез коричных кислот). Реакции присоединения по двойной связи.

64. Классификация реакций ароматического электрофильного замещения. Влияние заместителей в бензольном кольце на скорость и направление электрофильного замещения. Согласованная и несогласованная ориентация.

65. Нитрование. Нитрующие агенты. Механизм реакции нитрования. Нитрование бензола и его замещенных. Нитрование бифенила, нафталина, ароматических аминов и фенола.

66. Получение полинитросоединений. Ипсо-атака и ипсо-замещение в реакциях нитрования. Восстановление нитро-группы в различных условиях.

67. Галогенирование. Галогенирующие агенты. Механизм галогенирования аренов и их производных.

68. Сульфирование. Сульфирующие агенты. Кинетический и термодинамический контроль реакции (сульфирование фенола и нафталина). Превращение сульфогруппы.

69. Алкилирование аренов по Фриделю-Крафтсу. Алкилирующие агенты. Механизм реакции. Полиалкилирование. Побочные процессы: изомеризация алкилирующего агента и конечных продуктов. Синтез диарил- и триарилметанов.

70. Ацилирование аренов. Ацилирующие агенты. Механизм реакции. Региоселективность ацилирования. Особенности ацилирования фенолов, перегруппировка Фриса. Формилирование по Гаттерману-Коху, Гаттерману и Вильсмейеру. Область применения этих реакций.

71. Нитроалканы. Синтез из алкилгалогенидов. Кислотность и тautомерия нитроалканов. Конденсация с карбонильными соединениями (Анри). Восстановление в амины. Превращение вторичных нитроалканов в кетоны.

72. Методы получения аминов: алкилирование аммиака и аминов по Гофману, фталимида калия (Габриэль), восстановление азотсодержащих производных карбонильных соединений и карбоновых кислот, нитросоединений, алкилазидов. Перегруппировки Гофмана и Курциуса. Синтез аминов с третичным алкильным радикалом (Риттер).

73. Реакции аминов. Алкилирование и ацилирование. Термическое разложение гидроксидов тетраалкиламмония по Гофману. Окисление третичных аминов до Ноксидов, их термолиз (Коуп). Получение нитронов из N,N-диалкилгидроксиаминов. Реакции [3+2]-циклоприсоединения нитронов (образование пятичлененных азотистых гетероциклов).

74. Пятичленные гетероциклы с одним гетероатомом. Фуран, пиррол, тиофен. Синтез из 1,4-дикарбонильных соединений (Пааль—Кнорр). Синтез пирролов по Кнорру и по Ганчу. Синтез 3,4-дизамещенных тиофенов по Хинсбергу.

75. Реакции электрофильного замещения в пятичлененных ароматических гетероциклах: нитрование, сульфирование, галогенирование, формилирование, ацилирование. Индол. Синтез производных индола из фенилгидразина и кетонов (Фишер). Реакции электрофильного замещения в пиррольном кольце индола: нитрование, формилирование, галогенирование.

76. Шестичленные ароматические гетероциклы с одним гетероатомом. Пиридин и хинолин. Синтез производных пиридина по Ганчу. Синтез частично гидрированных производных пиридина путем [4+2]-циклоприсоединения (гетеро-реакция Дильса—Альдера). Синтез хинолина и замещенных хинолинов из анилинов по Скраупу и Дебнеру—Миллеру.

77. Реакции пиридина и хинолина с алкилгалогенидами. Окисление и восстановление пиридина и хинолина. Реакции электрофильного замещения в пиридине и хинолине: нитрование, сульфирование, галогенирование. N-окиси пиридина и хинолина и их использование в реакции нитрования.

79. Нуклеофильное замещение атомов водорода в пиридине и хинолине в реакциях с амидом натрия (Чичибабин) и фениллитием. 2- и 4-метилпиридины и хинолины как метиленовые компоненты в конденсациях с альдегидами.

Направленность 02.00.04 – Физическая химия

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

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

3. Колебания молекул. Нормальные колебания, амплитуды и частоты колебаний, частоты основных колебательных переходов.

4. Электронное строение атомов и молекул. Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Электронная плотность. Гибридизация.

5. Представления о зарядах на атомах и порядках связей. Различные методы выделения атомов в молекулах.

6. Дипольный момент и поляризуемость молекул. Магнитный момент и магнитная восприимчивость. Эффекты Штарка и Зеемана. Магнитно-резонансные методы исследования строения молекул. Химический сдвиг.

7. Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий. Молекулярные комплексы. Ван-дер-ваальсовы молекулы. Кластеры атомов и молекул. Водородная связь. Супермолекулы и супрамолекулярная химия.
8. Строение молекул простых и координационных неорганических соединений. Полиядерные комплексные соединения. Строение основных типов органических и элементоорганических соединений. Соединения включения. Полимеры и биополимеры.
9. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Типы дефектов в реальных кристаллах. Кристаллы с неполной упорядоченностью. Доменные структуры.
10. Кристаллографические точечные группы симметрии, типы решеток, сингонии. Понятие о пространственных группах кристаллов. Индексы кристаллографических граней.
11. Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов. Цепочечные, каркасные и слоистые структуры.
12. Аморфные вещества. Особенности строения полимерных фаз.
13. Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов.. Различные типы проводимости. Ширина запрещённой зоны.
14. Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Структура воды и водных растворов.
15. Мицеллообразование и строение мицелл. Мезофазы. Пластические кристаллы. Жидкие кристаллы (нематики, смектики, холестерики и др.).
16. Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей, структура границы раздела конденсированных фаз. Молекулы и кластеры на поверхности. Структура адсорбционных слоев.
17. Изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, интенсивные и экстенсивные переменные. Уравнения состояния.
18. Первый закон термодинамики. Теплота, работа, внутренняя энергия, энталпия, теплоемкость. Закон Гесса. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгофа.
19. Второй закон термодинамики. Энтропия и ее изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно Клаузиуса. Различные шкалы температур.
20. Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца. Уравнения Максвелла. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов.
21. Уравнение Гиббса Гельмгольца. Работа и теплота химического процесса. Химические потенциалы.
22. Химическое равновесие. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции.
23. Поступательная, вращательная, электронная и колебательная суммы по состояниям. Статистический расчет энтропии. Постулат Планка и абсолютная энтропия.

24. Основные положения термодинамики неравновесных процессов. Локальное равновесие. Флуктуации. Функция диссипации. Потоки и силы. Скорость производства энтропии.
25. Зависимость скорости производства энтропии от обобщенных потоков и сил. Соотношения взаимности Онсагера. Стационарное состояние системы и теорема Пригожина.
26. Различные типы растворов. Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов. Давление насыщенного пара жидкого раствора, закон Рауля.
27. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение.
28. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия.
29. Осмотические явления. Обратный осмос. Мембранные процессы.
30. Гетерогенные системы. Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса.
31. Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды, серы, фосфора и углерода. Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона Клаузиуса.
32. Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Равновесие жидкость пар в двухкомпонентных системах. Законы Гиббса Коновалова. Азеотропные смеси.
33. Фазовые переходы второго рода.
34. Адсорбция. Адсорбент, адсорбат. Виды адсорбции. Структура поверхности и пористость адсорбента. Локализованная и делокализованная адсорбция. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Динамический характер адсорбционного равновесия.
35. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Лэнгмюра. Адсорбция из растворов. Уравнение БЭТ для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента.
36. 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.
37. Эффект Ребиндера: изменение прочности и пластичности твердых тел вследствие снижения их поверхностной энергии.
38. Капиллярные явления. Зависимость давления пара от кривизны поверхности жидкости. Капиллярная конденсация. Зависимость растворимости от кривизны поверхности растворяющихся частиц (закон Гиббса Оствальда Фрейндлиха).
39. 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 Хюкеля. Потенциал ионной атмосферы.

40. Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и в электрохимической цепи. Термодинамика гальванического элемента. Электродвижущая сила, ее выражение через энергию Гиббса реакции в элементе. Понятие электродного потенциала.

41. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Электрофоретический и релаксационные эффекты.

42. 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.

43. Феноменологическая кинетика сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций.

44. Цепные реакции. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций. Кинетические особенности разветвленных цепных реакций. Предельные явления в разветвленных цепных реакциях.

45. Реакции в потоке. Реакции идеального вытеснения и идеального смешения. Колебательные реакции.

46. 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).

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

48. 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.

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

50. 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.

51. Различные типы химических реакций. Мономолекулярные реакции в газах, схема Линдемана Христиансена. Бимолекулярные и тримолекулярные реакции, зависимость предэкспоненциального множителя от температуры.

52. Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц.

53. 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.
54. Электрохимические реакции. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Теория Гуи Чапмена Грэма.
55. Химические источники тока, их виды. Электрохимическая коррозия. Методы защиты от коррозии.
56. Классификация каталитических реакций и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия.
57. Гомогенный катализ. Кислотно-основной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Специфический и общий основной катализ. Нуклеофильный и электрофильный катализ.
58. Катализ металлокомплексными соединениями. Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы.
59. Ферментативный катализ. Адсорбционные и каталитические центры ферментов. Активность и субстратная селективность ферментов. Коферменты. Механизмы ферментативного катализа.
60. Гетерогенный катализ. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Удельная и атомная активность. Селективность катализаторов.
61. Роль адсорбции в кинетике гетерогенных каталитических реакций. Неоднородность поверхности катализаторов, нанесенные катализаторы. Энергия активации гетерогенных каталитических реакций.
62. Современные представления о функционировании гетерогенных катализаторов.
63. Основные промышленные каталитические процессы.

Направленность 02.00.08 – Химия элементоорганических соединений

1. Определение и классификация элементоорганических соединений (ЭОС). Основные этапы развития химии ЭОС. Ее влияние на теорию химического строения молекулярных систем.
2. Метод молекулярных орбиталей (МО) как основа современной квантовой химии. Основные принципы построения неэмпирических и полуэмпирических квантово-химических методов. Использование методов квантовой химии для расчетов наблюдаемых свойств молекул. Анализ электронного строения молекул в терминах эффективных зарядов на атомах и заселеностей (порядков) связей.
3. Сопряженные молекулы как лиганды в ЭОС. Метод Хюккеля. Схемы π -электронных уровней энергий и π -МО аллила, бутадиена, аниона цикlopентадиенила, бензола, циклооктатетраена.
4. Концепция ароматичности в химии ЭОС. Примеры металлогорганических ароматических систем.

5. Природа химических связей в ЭОС. Гибридные орбитали и принципы их использования в качественной теории химического строения. Классификация типов химических связей в ЭОС. Химические связи в электронодефицитных молекулах (на примерах простейших и полиэдрических гидридов бора и карборанов).

6. Природа связи в олефиновых, ацетиленовых, цикlopентадиенильных и ареновых комплексах переходных металлов. Кратные связи элемент-углерод и элемент-элемент. Многоцентровые связи.

7. Качественные способы оценки стабильности ЭОС. Правило эффективного атомного номера. Принцип изолобальной аналогии и его приложения.

8. Основные типы реагентов (электрофилы, нуклеофилы, протофилы, радиофилы, карбеноиды). Классификация основных типов реакций с участием ЭОС. Реакции по связи металл–лиганд (реакции замещения, присоединения, элиминирования, фрагментации, внедрения, окислительного присоединения, восстановительного элиминирования).

Физические методы исследования структуры и электронного строения ЭОС

9. ЯМР-спектроскопии (импульсная ЯМР-фурье спектроскопия, динамический ЯМР) в исследовании строения и реакционной способности ЭОС. Физические и теоретические основы метода. Понятие об основных ЯМР-параметрах: химическом сдвиге, константах спин-спинового взаимодействия, временах релаксации. Области применения в химии ЭОС: изучение строения и динамики молекул, определение примесей.

10. Масс-спектрометрия. Физические и теоретические основы метода. Области применения в химии ЭОС: установление состава и строения молекул, качественный и количественный анализ смесей (хромато-масс-спектрометрия), определение микропримесей, изотопный анализ, измерение термохимических параметров (энергии ионизации молекул, энергии появления ионов, энергии диссоциации связей), изучение ионно-молекулярных реакций, газофазная кислотность и основность молекул.

11. Метод рентгеноструктурного анализа (РСА). Физические и теоретические основы метода. Области применения в химии ЭОС: установление строения молекул и кристаллов, исследование природы химических связей.

12. Фото- (ФЭС) и рентгенофотоэлектронная (ЭСХА) спектроскопии. Физические и теоретические основы методов. Применение в химии ЭОС: изучение электронного строения молекул, измерение энергий ионизации.

13. Оптическая спектроскопия (ИК, УФ, КР). Физические и теоретические основы методов. Применение в химии ЭОС: установление строения молекул, изучение динамики молекул, измерение концентрации. Применение симметрии при интерпретации экспериментальных спектров.

14. Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). Физические и теоретические основы методов. Применение в химии ЭОС: установление строения радикалов, изучение динамики молекул и механизмов радикальных реакций.

Органические производные непереходных элементов

15. Органические производные щелочных металлов (I группа). Литийорганические соединения, их свойства, строение, методы получения и применение в органическом синтезе. Реакции металлизации. Ароматические анион-радикалы: образование, строение, свойства.

16. Магнийорганические соединения: получение, строение, свойства. Роль растворителя в синтезе магнийорганических соединений. Реакционная способность магнийорганических соединений и их применение в органическом и металлорганическом синтезе.

17. Цинк- и кадмийорганические соединения: получение, строение, свойства. Реакция Реформатского.

18. Органические соединения ртути: получение, строение, свойства. Меркурирование ароматических соединений. Реакция Несмеянова. Симметризация и диспропорционирование ртутьорганических соединений. Ртутьорганические соединения в синтезе органических производных других металлов и органическом синтезе.

19. Бороганические соединения. Основные типы соединений, синтез, свойства, реакции. Гидроборирование ненасыщенных соединений, региоселективность реакции. Применение бороганических соединений в органическом синтезе.

20. Алюминийорганические соединения. Основные типы соединений, синтез, свойства, реакции. Катализаторы Циглера-Натта. Применение алюминийорганических соединений в промышленности и органическом синтезе.

21. Применение таллийорганических соединений в органическом синтезе.

22. Кремнийорганические соединения: получение, строение, свойства. Гидросилирование ненасыщенных производных. Полиорганосилоксаны. Силиловые эфиры. Кремнийорганические соединения в органическом синтезе и промышленности.

23. Германий-, олово- и свинецорганические соединения. Основные типы соединений, получение, строение, свойства и реакции. Представление о гипервалентных соединениях.

24. Органические производные фосфора и мышьяка, основные типы соединений высшей и низшей степеней окисления, методы синтеза, строение, свойства. Гетероциклические соединения фосфора. Реакция Виттига. Применение органических производных элементов 15 группы в промышленности, сельском хозяйстве, медицине.

25. Сурьма- и висмуторганические соединения. Основные типы соединений высшей и низшей степеней окисления, методы синтеза, строение, свойства.

Органические производные переходных металлов

26. Классификация металлорганических соединений переходных металлов по типу лигандов, координированных с металлом.

27. Карбонильные комплексы переходных металлов. Основные типы карбонилов металлов. Методы синтеза, строение и реакции. Карбонилат анионы, карбонил галогениды, карбонилгидриды. Природа связи металл-карбонил. Практическое применение карбонилов металлов.

28. Металлкарбонильные кластеры переходных металлов. Основные типы, получение. Стереохимическая нежесткость: миграция карбонильных, гидридных, углеводородных лигандов и металлического остова.

29. Соединения с σ -связью металл-углерод. Основные типы σ -органических производных переходных металлов: синтез, строение, свойства. Факторы, влияющие на их устойчивость. Роль стабилизирующих n - и σ -лигандов. Реакции σ -производных: расщепление σ -связи M-C, внедрение ненасыщенных молекул, восстановительное элиминирование, σ -перегруппировки.

30. Карбеновые и карбиноевые комплексы переходных металлов. Карбеновые комплексы переходных металлов. Электронное строение. Реакции карбеновых комплексов Фишера (нуклеофильное присоединение к углероду, депротонирование связей С–Н). Роль карбеновых комплексов в катализе (метатезис олефинов). Метатезис циклических алканов.

31. π -Комплексы переходных металлов. Общая характеристика строения и устойчивости. Различные типы связей металл–лиганд. Структурно нежесткие соединения. Внутренняя динамика молекул.

32. π -Комплексы металлов с олефинами. Типы комплексов с линейными и циклическимиmono- и полиолефинами. Методы получения, строение, свойства. Природа связи олефина с металлом. Реакции π -координированных лигантов. Циклобутадиенжелезотрикарбонил. Роль олефиновых комплексов в катализе.

33. π -ацетиленовые комплексы. Типы ацетиленовых комплексов. Методы получения, строение, свойства. Моно- и биметаллические комплексы.

34. Цикlopентадиенильные комплексы. Металлоцены: ферроцен, никелецен, кобальтоцен. Синтез. Реакционная способность (замещение в лиганде, реакции с разрывом связи металл-кольцо, редокс-реакции). Металлоценилалкильные катионы.

35. Цикlopентадиенильные производные титана и циркония. Типы комплексов. Синтез, применение в катализе процессов полимеризации.

36. Цикlopентадиенилкарбонильные комплексы. Синтез. Химия цикlopентадиенилмарганецтрикарбонила (цимандрена). Цикlopентадиенилкарбонильные комплексы железа, кобальта, молибдена.

37. Типы ареновых комплексов. Бис-ареновые комплексы хрома. Методы получения и реакции.

38. Аренхромтрикарбонильные комплексы. Методы получения и реакции. Применение в органическом синтезе.

39. Катионные ареновые комплексы железа и марганца. Синтез и реакции.

40. Олигомеризация олефинов и ацетиленов. Никелевые комплексы в катализе олигомеризации этилена. Циклоолигомеризация (системы, содержащие никель(0)) и линейная олигомеризация бутадиена (системы, содержащие палладий(0)). Циклическая тримеризация и тетрамеризация ацетиленов (синтез производных бензола и циклооктатетраена).

41. Полимеризация олефинов: катализаторы Циглера-Натта, полиэтилен, полипропилен. Стереоспецифическая полимеризация бутадиена.

42. Изомеризация олефинов: миграция двойной связи с участием металлалкильных и металлаллильных интермедиатов. Реакция метатезиса олефинов.

43. Каталитические превращения моноуглеродных молекул; оксо-синтез: кобальтовые и родиевые катализаторы. Синтез Фишера-Тропша. Конверсия водяного газа. Карбонилирование и гидрокарбонилирование.

44. Окисление олефинов: эпоксидирование, катализируемое переходными металлами. Получение ацетальдегида и винилацетата из этилена. Метатезис олефинов и ацетиленов. Реакция кросс-сочетания.

4.2 Требования к реферату по специальной дисциплине

Реферат по специальной дисциплине должен показать исследовательский потенциал поступающего, его подготовленность к выполнению научно-исследовательской программы аспирантуры. Объем реферата не должен превышать 15 страниц текста через 1,5 интервала, шрифт Times New Roman, номер 14; размеры полей: верхнее и нижнее – 2 см, левое – 3 см, правое – 1,0 см, выравнивание по ширине. Реферат должен содержать краткий обзор литературы (состояние вопроса) по предмету исследования, формулировку и обоснование проблемы: ее актуальность, фундаментальные и прикладные аспекты, степень разработанности. Реферат должен содержать достаточное количество оригинальных источников (ориентировочно 20–25), в том числе ссылки на публикации за последние десять лет. В текст реферата могут быть включены схемы, таблицы, рисунки, приложения. Реферат представляется в сброшюрованном виде.

Структура реферата:

- титульный лист (см. Приложение);
- введение (актуальность, цель, задачи, методы исследования);
- проблемы исследования, ожидаемые результаты;
- заключение (выводы);
- список литературы;

- список опубликованных и направленных в печать статей и материалов (при наличии).

В реферате автор должен показать знание текущего состояния исследований в выбранной научной области, умение анализировать литературные источники, делать выводы о перспективах предполагаемого исследования. Реферат представляется в приемную комиссию и на профильную кафедру не позднее, чем за две недели до вступительного испытания по специальной дисциплине. Профильная кафедра передает в экзаменационную комиссию реферат и рецензию на реферат. Рецензия принимается во внимание при проведении второй части экзамена – собеседования по тематике предполагаемого диссертационного исследования.

5. Описание шкал оценивания

Экзамен по специальной дисциплине оценивается по 25-балльной шкале. Собеседование по тематике предполагаемого диссертационного исследования на основе подготовленного поступающим реферата оценивается по 25-балльной шкале. Минимальное количество баллов, подтверждающее успешное прохождение каждой части вступительного испытания, устанавливается равным 15 баллам. Результирующая оценка за вступительное испытание по специальной дисциплине складывается из оценки за экзамен по специальной дисциплине и оценки за собеседование по тематике предполагаемого диссертационного исследования на основе подготовленного поступающим реферата.

Шкала оценивания экзамена по специальной дисциплине

Баллы	Уровень подготовленности, характеризуемый оценкой
1-5	Нет ответа. Нет понимания предмета. Отсутствие правильной формулировки ответа на вопрос даже с помощью преподавателя. Ответ с большим количеством грубых ошибок.
6-10	Ответ с 2-мя и более грубыми ошибками, много неточностей, знания несистематические. Отсутствие правильной формулировки ответа на вопрос даже с помощью преподавателя.
11-15	В целом положительный ответ с 3-4 незначительными ошибками. Умение с помощью преподавателя схематично, но правильно сформулировать ответ на поставленный вопрос, но нет свободного владения информацией, глубины

	знаний.
16-20	В целом хороший ответ с несколькими незначительными ошибками, умение сопоставить теоретические знания. Умение правильно сформулировать ответ на поставленный вопрос. Владение информацией как минимум из одного источника основной литературы. Уверенные знания, с некоторыми неточностями.
21-25	Полный развернутый ответ, демонстрирующий системные знания, умение сопоставить теоретические знания, свободное владение информацией из нескольких источников основной и дополнительной литературы. Иллюстрация ответа дополнительными примерами из собственных наблюдений и дополнительных источников информации.

Шкала оценивания собеседования на основе реферата

Баллы	Уровень подготовленности, характеризуемый оценкой
1-5	Содержание не соответствует теме реферата, материал не систематизирован или плохо систематизирован, не структурирован, основные понятия проблемы не раскрыты; в постановке проблемы нет самостоятельности; в формулировании нового аспекта выбранной для анализа проблемы не продемонстрировано умение обобщать, сопоставлять различные точки зрения по рассматриваемому вопросу, аргументировать основные положения и выводы; неправильно оформлены ссылки на используемую литературу; продемонстрированы низкая грамотность и отсутствие культуры изложения и оформления. Автор не владеет материалом, изложенным в реферате.
6-10	Содержание не полностью соответствует теме реферата, материал систематизирован и структурирован с недочетами, основные понятия проблемы раскрыты не полностью; в постановке проблемы отсутствует самостоятельность; в формулировании нового аспекта выбранной для анализа проблемы не продемонстрировано умение обобщать; присутствие только основных «классических» литературных источников по проблеме; правильно оформлены ссылки на используемую литературу. Автор плохо владеет материалом, изложенным в реферате.
11-15	Содержание соответствует теме реферата, но основные понятия проблемы не раскрыты; в формулировании нового аспекта выбранной для анализа проблемы не продемонстрировано умение обобщать, недостаточное количество используемых источников, небрежно оформлены ссылки на используемую литературу. Автор не демонстрирует свободное владение материалом, изложенным в реферате.
16-20	Содержание соответствует теме реферата, материал систематизирован и структурирован, основные понятия проблемы раскрыты; в постановке проблемы присутствует новизна; в формулировании нового аспекта выбранной для анализа проблемы продемонстрировано умение обобщать; присутствие основных «классических» литературных источников по проблеме; правильно оформлены ссылки на используемую литературу; продемонстрирована грамотность и культура изложения, культура оформления. Автор свободно владеет материалом, изложенным в реферате, однако, не может поддержать дискуссию.
21-25	Содержание соответствует теме реферата, материал систематизирован и структурирован, основные понятия проблемы раскрыты полностью и глубоко; в постановке проблемы присутствует новизна и самостоятельность; в формулировании нового аспекта выбранной для анализа проблемы продемонстрировано умение обобщать, сопоставлять различные точки зрения по рассматриваемому вопросу, аргументировать основные положения и выводы;

присутствие основных «классических» литературных источников по проблеме наряду с оригинальными работами; правильно оформлены ссылки на используемую литературу; продемонстрирована грамотность и культура изложения, культура оформления. Автор свободно владеет материалом, изложенным в реферате, может поддержать дискуссию.

6 Источники для подготовки

02.00.03 – Органическая химия

а) основная литература

1. Ингольд К. Теоретические основы органической химии. М.: Мир, 1973.
2. Марч Дж. Органическая химия, Т. 1-4. М.: Мир, 1987.
3. Реутов О.А., Курц А.Л., Бутин К.П. Органическая химия. Ч. 1-4. М.: Изд-во МГУ, 1999.
4. Кери Ф., Сандберг Р. Углубленный курс органической химии. Кн. 1, 2. М.: Химия, 1981.
5. Сайкс П. Механизмы реакций в органической химии. Вводный курс. М.: Химия, 2000.
6. Джилкрист Т.Л. Химия гетероциклических соединений. М.: Мир, 1996.
7. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Ростов-на-Дону: Феникс, 1997.
8. Потапов В.М. Стереохимия. М.: Химия, 1988.
9. Титце Л., Айхер Т. Препартивная органическая химия. Реакции и синтезы в практикуме органической химии и научно-исследовательской лаборатории. М.: Мир, 1999.
10. Органикум: Практикум по органической химии / Г. Беккер, В. Бергер и др. Т. 1, 2. М.: Мир, 1992.

б) дополнительная литература

1. Несмейнов А.Н., Несмейнов Н.А. Начала органической химии. Кн. 1,2. М.: Химия, 1974.
2. Шабаров Ю.С. Органическая химия. Т. 1,2. М.: Химия, 1994.
3. Робертс Дж., Касерио М. Основы органической химии. Т. 1,2. М.: Мир, 1978.
4. Неницеску, К.Д. Органическая химия. Т. 1,2. М.: И.-Л., 1963.
5. Терней А. Современная органическая химия. Т. 1,2. М.: Мир, 1981.
6. Моррисон Р. Бойд Р. Органическая химия. М.: Мир, 1974.
7. Беккер, Г. Введение в электронную теорию органических реакций. М.: Мир, 1977.

в) программное обеспечение и интернет-ресурсы

1. Российская Государственная библиотека URL: <http://www.rsl.ru/>
2. Российская национальная библиотека URL: <http://www.nlr.ru/>
3. Органическая химия [Электронный ресурс] : в 4 ч. Ч. 2 / О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин. – 6-е изд. (эл.). – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. – 626 с. <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=542433#none>
4. Органическая химия [Электронный ресурс] : в 4 ч. Ч. 3 / О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. – 547 с. <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=541050#none>
5. Смит, В.А. Основы современного органического синтеза [Электронный ресурс] : учебное пособие / В. А. Смит, А. Д. Дильман. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. – 753 с. <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=541053#none>
6. Титце, Л. Домино-реакции в органическом синтезе. [Электронный ресурс] /Л. Титце, Г. Браше, К. Герике. – Электрон. дан. – М.: Издательство "Лаборатория знаний", 2015. – 674с. – Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/66355>

7. Слижов, Ю.Г. Реакции окисления в органическом синтезе. Учебно-методическое пособие. [Электронный ресурс] / Ю.Г. Слижов, Т.Т. Куряева, В.В. Хасанов. – Электрон. дан. – Томск: ТГУ, 2013. – 40с. – Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/44998>
8. Реакции diazotирования азосочетания в органическом синтезе: Учебно-методическое пособие. [Электронный ресурс] – Электрон. дан. – Томск: ТГУ, 2016. – 24с. – Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/74562>
9. Юрковская, М.А. Химия ароматических гетероциклических соединений. [Электронный ресурс] – Электрон. дан. – М.: Издательство "Лаборатория знаний", 2015. – 211с. – Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/66368>
10. Применение ИК и ПМР спектроскопии при изучении строения органических молекул. [Электронный ресурс] – Электрон. дан. – Томск: ТГУ, 2016. – 60с. – Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/80246>

02.00.04 – Физическая химия

а) основная литература

1. Вилков Л. В., Пентин Ю. А. Физические методы исследования в химии. М.: Изд-во МГУ. Ч. 1: 1987. Ч. 2: 1989.
2. Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Теория строения молекул. Ростов-на-Дону: Феникс, 1997.
3. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, Изд-во МГУ, 2001.
4. Фларри Р. Квантовая химия. М.: Мир, 1985.
5. Полторак О. М. Термодинамика в физической химии. М.: Высш. шк., 1991.
6. Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссилативных структур. М.: Мир, 2002.
7. Смирнова Н. А. Методы статистической термодинамики в физической химии. М.: Высш. шк., 1982.
8. Дамаскин Б. Б., Петрий О. А. Введение в электрохимическую кинетику. М.: Высш. шк., 1983.
9. Денисов Е. Т., Саркисов О. М., Лихтенштейн Г. И. Химическая кинетика. М.: Химия, 2000.
10. Эмануэль Н. М., Кнорре Д. Г. Курс химической кинетики. М.: Высш. шк., 1984.

б) дополнительная литература

1. Бейдер Р. Атомы в молекулах. М.: Мир, 2001.
2. Цирельсон В. Г., Зоркий П. М. Распределение электронной плотности в кристаллах органических соединений // Итоги науки и техники. Кристаллохимия. М.: ВИНИТИ, 1986.
3. Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Квантовая химия органических соединений.
4. Механизмы реакций. М.: Химия, 1986.
5. Агеев Е. П. Неравновесная термодинамика в вопросах и ответах. М.: Изд-во МГУ, 1999.
6. Адамсон А. Физическая химия поверхностей. М.: Мир, 1979.
7. Дамаскин Б. Б., Петрий О. А., Цирлина Г. А. Электрохимия. М.: Химия, 2001.
8. Даниэльс Ф., Олберти Р. Физическая химия. М.: Мир, 1978.
9. Дуров В. А., Агеев Е. П. Термодинамическая теория растворов неэлектролитов. М.: Изд-во МГУ, 1987.
10. Хаазе Р. Термодинамика необратимых процессов М.: Мир, 1967.
11. Эткинс Н. Физическая химия. Т. 1, 2. М.: Мир, 1980.
12. Панченков Г. М., Лебедев В. П. Химическая кинетика и катализ. М.: Химия, 1985.

в) программное обеспечение и интернет-ресурсы

1. Российской Государственная библиотека: <http://www.rsl.ru/>
2. Российской национальной библиотека: <http://www.nlr.ru/>
3. Болвако А.К., Дудчик Г.П. - Применение электронных таблиц при изучении физической химии // Труды БГТУ. №8. Учебно-методическая работа - 2014г. №8(172) <https://e.lanbook.com/reader/journalArticle/198491/#1>
4. Формальная кинетика: Учебно-методическое пособие по курсу «Физическая химия» для студентов химического факультета ТГУ, обучающихся по направлению подготовки 04.03.01 – Химия и специальности 04.05.01 – Фундаментальная и прикладная химия: <https://e.lanbook.com/book/112896>
5. Кумыков, Р.М. Физическая и коллоидная химия : учебное пособие / Р.М. Кумыков, А.Б. Иттиев. – Санкт-Петербург : Лань, 2019. — 236 с. — ISBN 978-5-8114-3519-7. – Текст : электронный // Электронно-библиотечная система «Лань»: – : <https://e.lanbook.com/book/116357>
6. Свиридов, В.В. Физическая химия : учебное пособие / В.В. Свиридов, А.В. Свиридов. — Санкт-Петербург : Лань, 2016. — 600 с. // Электронно-библиотечная система «Лань»: <https://e.lanbook.com>
7. Бокштейн, Б.С. Физическая химия: термодинамика и кинетика : учебное пособие / Б.С. Бокштейн, М.И. Менделев, Ю.В. Похвиснев. — Москва : МИСИС, 2012. — 258 с. // Электронно-библиотечная система «Лань»: <https://e.lanbook.com>
8. Типовые расчеты по физической и коллоидной химии : учебное пособие / А.Н. Васюкова, О.П. Задачина, Н.В. Насонова, Л.И. Перепёлкина. — Санкт-Петербург : Лань, 2014. — 144 с.: <https://e.lanbook.com/book/45679>
9. Морачевский, А.Г. Физическая химия. Поверхностные явления и дисперсные системы : учебное пособие / А.Г. Морачевский. — 2-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2015. — 160 с.: <https://e.lanbook.com/book/64335>
10. Максимов, А.И. Введение в нелинейную физическую химию : учебное пособие / А.И. Максимов. — Иваново : ИГХТУ, 2010. — 174 с.: <https://e.lanbook.com/book/4513>

02.00.08 – Химия элементоорганических соединений

a) основная литература

1. Эльшенбройх, К. Металлорганическая химия / пер. с нем. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011. 746 с.
2. Общая органическая химия/ под ред. Д. Бартона. Т. 6-7. М.: химия, 1984.
3. Методы элементоорганической химии/ под ред. А.Н. Несмеянова, К.А. Кочешкова. М.: Наука, 1973.
4. Грин, М. Металлоорганические соединения переходных металлов / М. Грин. М.: Мир, 1972. 520 с.
5. Гринвуд, Н. Химия элементов / Н. Гринвуд, А. Эрншо. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. 720 с.
6. Химия элементоорганических соединений / под ред. Р.А. Черкасова. Казань: Изд-во Казанского ун-та. 1992. 130 с.
7. Шарутин, В.В. Именные реакции в химии элементоорганических соединений: справочник / В.В. Шарутин, В.С. Сенчурин. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2011. 472 с.
8. Соколов М.Н., Самсоненко Д.Г. Координационная химия: учебное пособие / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 2011. Ч. II: Металлоорганические соединения, катализ с участием комплексов переходных металлов, кластерные соединения. 194 с.
9. Реутов О.А., Курц А.Л., Бутин К.П. Органическая химия. Часть 4. М.: Бином. Лаборатория знаний, 2004.
10. Коттон Ф., Уилкинсон Дж. Основы неорганической химии. Гл. 28-31. М.: Мир, 1979.

б) дополнительная литература

1. Хьюи Ж. Неорганическая химия. Строение вещества и реакционная способность. М.: Химия, 1987.
2. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. М.: Высш.шк., 1979.
3. Белецкая И.П., Реутов О.А, Соколов В.И. Механизмы реакций металлоорганических соединений. М.: Химия, 1972.
4. Драго Р. Физические методы в химии. Т.1,2. М.: Мир, 1981.
5. Гюнтер Х. Введение в курс спектроскопии ЯМР. М.: Мир, 1984.
6. Пурделя Д., Вылчану Р. Химия органических соединений фосфора. М.: Химия, 1972.
7. Шульпин Г.Б. Органические реакции, катализируемые комплексами металлов. М.: Наука, 1988.
8. Металлоорганическая химия переходных металлов / Дж. Колмен, Л. Хегедас, Дж. Нортон, Р. Финке. М.: Мир, 1989.
9. Бухаров, С.В. Технология тонкого органического синтеза. Ч. III. Элементоорганические соединения. [Электронный ресурс] / С.В. Бухаров, И.З. Илладинов, Г.Ю. Климентова, Г.Н. Нукуманова. Казань : КНИТУ, 2006. 72 с.
10. Цудзи Д. Органические синтезы с участием комплексов переходных металлов. М.: Химия, 1979.

в) программное обеспечение и интернет-ресурсы

1. Российская Государственная библиотека URL: <http://www.rsl.ru/>
2. Российская национальная библиотека URL: <http://www.nlr.ru/>
4. Органическая химия [Электронный ресурс] : в 4 ч. Ч. 4 / О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. – 547 с. <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=541050#none>
5. Смит, В.А. Основы современного органического синтеза [Электронный ресурс] : учебное пособие / В. А. Смит, А. Д. Дильман. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. – 753 с. <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=541053#none>
6. Титце, Л. Домино-реакции в органическом синтезе. [Электронный ресурс] /Л. Титце, Г. Браше, К. Герике. – Электрон. дан. – М.: Издательство "Лаборатория знаний", 2015. – 674с. – Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/66355>
7. Слижов, Ю.Г. Реакции окисления в органическом синтезе. Учебно-методическое пособие. [Электронный ресурс] / Ю.Г. Слижов, Т.Т. Куряева, В.В. Хасанов. – Электрон. дан. – Томск: ТГУ, 2013. – 40с. – Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/44998>
8. Реакции диазотирования азосочетания в органическом синтезе: Учебно-методическое пособие. [Электронный ресурс] – Электрон. дан. – Томск: ТГУ, 2016. – 24с. – Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/74562>
9. Юровская, М.А. Химия ароматических гетероциклических соединений. [Электронный ресурс] – Электрон. дан. – М.: Издательство "Лаборатория знаний", 2015. – 211с. – Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/66368>
10. Применение ИК и ПМР спектроскопии при изучении строения органических молекул. [Электронный ресурс] – Электрон. дан. – Томск: ТГУ, 2016. – 60с. – Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/80246>
11. Биометаллоорганическая химия [Электронный ресурс] / Ж. Жауэн М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. — 505 с. <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=541203>

Составители:

Декан химического факультета, д.х.н. Б.В. Авдин 

Заведующий кафедрой
теоретической и прикладной химии д.х.н., профессор О.К. Шарутина 

Профессор кафедры
теоретической и прикладной химии д.х.н., профессор Д.Г. Ким 

Программа одобрена на заседании Ученого совета Института естественных и точных наук
от 21 октября 2019 года, протокол № 2.