

УТВЕРЖДАЮ

Директор ИОФХ им. А.Е. Арбузова
КазНИИ РАН, академик



[Handwritten signature]

О.Г. Синяшин

«14» *апрель* 2016 г.

(рекомендовано к утверждению
Ученым советом Института, протокол
№ 4 от «14» *апрель* 2016 г.)

ПРОГРАММА

кандидатского экзамена по специальности 02.00.04 - *Физическая химия,*
отрасли наук *Химические науки,*
аспиранта *Шариновой Анастасии Владимировны,*
выполняющей диссертационную работу по теме:
«Использование самоорганизации хромофоров, встроенных в дендритные
фрагменты в боковых цепях эпоксиаминных олигомеров, при дизайне новых
электрооптических материалов»

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 не электролитов. 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 Γ - 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, теплоёмкости и энтропии, обусловленные поступательным, вращательным и колебательным движением.

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

Распределения Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака. Вырожденный идеальный газ. Электроны в металлах. Уровень Ферми. Статистическая теория Эйнштейна идеального кристалла, теория Дебая. Точечные дефекты кристаллических решеток. Равновесные и неравновесные дефекты. Вычисление сумм по состояниям для

кристаллов с различными точечными дефектами. Нестехиометрические соединения и их термодинамическое описание.

Элементы термодинамики необратимых процессов

6. Основные положения термодинамики неравновесных процессов. Локальное равновесие. Флуктуации. Функция диссипации. Потоки и силы. Скорость производства энтропии. Зависимость скорости производства энтропии от обобщенных потоков и сил. Соотношения взаимности Онсагера. Стационарное состояние системы и теорема Пригожина.

Термодиффузия и её описание в неравновесной термодинамике. Уравнение Чепмена – Энскога.

Растворы. Фазовые равновесия

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

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

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

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

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

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

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

Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста.

Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.

Адсорбция и поверхностные явления

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

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

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

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

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

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

Электрохимические процессы

11. Растворы электролитов. Ион-дипольное взаимодействие, как основной процесс, определяющий устойчивость растворов электролитов. Коэффициенты активности в растворах электролитов. Средняя активность и средний коэффициент активности, их связь с активностью отдельных ионов. Основные положения теории Дебая – Хюккеля. Потенциал ионной атмосферы.

Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и в электрохимической цепи. Термодинамика гальванического элемента. Электродвижущая сила, её выражение через энергию Гиббса реакции в элементе. Уравнения Нернста и Гиббса – Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи. Понятие электродного потенциала. Определение коэффициентов активности на основе измерений ЭДС гальванического элемента.

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

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. Колебательные реакции.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Электрокапллярные явления, уравнение Липпмана.

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

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

Катализ

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

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

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

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

11. *Гетерогенный катализ.* Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Удельная и атомная активность. Селективность катализаторов. Роль адсорбции в кинетике гетерогенных каталитических реакций. Неоднородность поверхности катализаторов, нанесенные катализаторы. Энергия активации гетерогенных каталитических реакций.

Современные теории функционирования гетерогенных катализаторов.

Основные промышленные каталитические процессы.

1. Основные представления нелинейной оптики.

Молекулярная и макроскопическая поляризация. Электрические восприимчивости разных порядков. Квадратичные нелинейно-оптические (НЛО) эффекты (генерация второй гармоники, эффект Поккельса). Молекулярные поляризуемости.

2. Микроскопический уровень описания НЛО отклика

Органические НЛО хромофоры (дипольные, квадрупольные, октупольные). Требования к хромофорам; показатель эффективности хромофоров (Figure of merit). Качественное описание квадратичного НЛО отклика: двух-уровневая модель; альтернирование длин/порядков связей (BLA/BOA).

3. Супрамолекулярные подходы в дизайне НЛО материалов

H- и J-агрегаты. Невалентные взаимодействия. Ван-дер-Ваальсовы комплексы. Влияние π -стекинга и водородного связывания на величину первой гиперполяризуемости.

4. Молекулярное моделирование структуры и свойств олигомеров с НЛО хромофорами

Силовые поля. Способы оценки частичных зарядов. Методы конформационного поиска и молекулярной динамики.

Иерархический подход к моделированию полимеров.

5. Вычислительные методы квантовой химии

Вариационный принцип. Метод Хартри-Фока. Приближение самосогласованного поля. Слэтеровский детерминант. Базисные наборы атомных орбиталей: минимальные, валентно-расщепленные, расширенные; поляризующие функции. Электронная корреляция и способы ее учета.

Метод функционала плотности; нестационарная теория. Учет дисперсионных взаимодействий. Обменно-корреляционные функционалы.

Литература к разделам I – III.

1. Адамсон А. Физическая химия поверхностей. М.: Мир. 1979. – 568с.
2. Бажин Н.М. и др. Термодинамика для химиков: Учебник для вузов / М.: Химия, 2001. – 408 с.
3. Байрамов В.М. Основы электрохимии: Уч. Пособие. – М.: Изд. Центр «Академия», 2005. – 240с.
4. Бейдер Р. Атомы в молекулах: Квантовая теория. – М.: Мир, 2001. – 532с.
5. Бердетт Дж. Химическая связь/ Пер. с англ. – М.: Бином. Лаб. Знаний, 2008. – 245с.
6. Боресков Г.К. Гетерогенный катализ. М.: Наука, 1986. – 303с.
7. Воронин А.И. и др. Динамика молекулярных реакций. – М.: Наука, 1990. – 420с.
8. Горшков В.И. Основы физической химии: учеб./В.И. Горшков, И.А. Кузнецов – 4-е изд. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2011. – 407 с.
9. Грибов Л.А. Элементы квантовой теории строения и свойств молекул: учебное пособие / Л.А. Грибов – Долгопрудный: Интеллект, 2010. – 310с.
10. Дамаскин Б.Б., Петрий О.А., Цирлина Г.А., Электрохимия. – Москва, Химия, 2001. 623с.
11. Деффейс К., Удивительные наноструктуры / К. Деффейс, С. Деффейс; под. Ред. Л.Н Патрикеева. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011. – 206с.: ил.
12. Кругляков П.М. Физическая и коллоидная химия / П.М. Кругляков, Т.Н. Хаскова – 2-е изд., испр. – М.: Высш. шк., 2007. – 319с.: ил.
13. Крылов О.В. Гетерогенный катализ: Учебное пособие. М.: Академкнига, 2004. – 679 с.
14. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. М.: Химия. 1986. – 246с.
15. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул (Электронные оболочки). М.: Высш. школа, 1979. – 467с.
16. Миомандр Ф. и др. Электрохимия. – М.: Техносфера, 2008. – 360с.
17. Мюнстер А. и др., Химическая термодинамика / пер. с нем. Агеев Е.П. – М.: УРСС, 2002. – 295с.
18. Накамура А., Цуцуи М. Принципы и применение гомогенного катализа. М.: Химия, 1983. – 231с.
19. Панченков Г.М., Лебедев В.П. Химическая кинетика и катализ. М.: Химия, 1985. – 590с.

20. Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии / Ю.А. Пентин, Л.В. Вилков. – М.: ВСТ, 2003. – 683с.
21. Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. М.: Мир, 2002. – 461с.
22. Ролдугин В.И. Физикохимия поверхности: Учебник – монография / В.И. Ролдугин. – Долгопрудный: Издательский дом «Интеллект»!, 2008. – 568с.
23. Романовский Б.В. Основы химической кинетики: Учебник. – М.: Издательство «Экзамен», 2006. – 415с.
24. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия – М.: Высш. шк., 1988. – 496с.
25. Скопенко В.В. и др. Координационная химия: Учеб. пособие - М.: ИКЦ «Академкнига», 2007. – 487с.
26. Суздаев И.П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов / И.П.Суздаев. – Изд. 2-е. испр. – М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ» 2009. – 200с.
27. Сумм Б.Д. Основы Коллоидной химии: Учебное пособие. – М.: Академия, 2006. – 238с.
28. Темкин О.Н. Гомогенный металлокомплексный катализ. Кинетические аспекты / О.Н.Темкин. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2008. – 918с.
29. Тоуб М. Механизмы неорганических реакций: пер. с англ. / М. Тоуб, Дж. Берджесс; под ред. А.А. Дроздова. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний,
30. Уманский С.Я. Теория элементарных химических реакций / С.Я. Уманский – Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2009. = 408с.
31. Умрихин В.А. Физическая химия: Учебное пособие. – М.: КДУ, 2009. – 232с.
32. Физическая и коллоидная химия: Учебник /ред. А.П. Беляев - М.: ГЭОТАР Медиа, 2010. – 700с.: ил., табл.
33. Хенрици – Эливэ Г., Оливэ С. Координация и катализ. М.: Мир, 1980. – 421с.
34. Хмельницкий Р.А. Физическая и коллоидная химия: учебн. Для с.-х. спец. вузов / Р.А.Хмельницкий. – 2-е изд., стер., перепечатка с первого издания 1988 года. – М.: ООО «Издательский Дом Альянс», 2009. – 400с.: ил.
35. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы молекулярные системы и твердые тела: Учеб. пособие для вузов / В.Г. Цирельсон – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. – 496с.: цв. ил. – (Учебник для высшей школы).

36. Чоркендорф И. Современный катализ и химическая кинетика / И.Чонкердорф, Х. Наймантсведрайт – Долгопрудный: Издательский дом «Интеллект», 2010. – 504с.
37. Щеголев И.Ф. Элементы статистической механики, термодинамики и кинетики: учебное пособие / И.Ф. Щеголев. – 2-е изд., испр. – Долгопрудный: Интеллект, 2010. – 208с.
38. Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики. М.: Высшая школа. 1984. – 463с.
39. Эткинс П. Физическая химия. В 2-х т. – М.: Мир, 1980.
- 40 Ягодовский В.Д. Статистическая термодинамика в физической химии. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2005. – 495с.

Литература.

1. P. N. Prasad, D. J. Williams. Introduction to Nonlinear Optical Effects in Molecules and Polymers. Wiley and Sons, New York, 1991, 307 p.
2. Ф. Цернике, Дж. Мидвинтер. Прикладная нелинейная оптика. М.: Мир, 1976, 261 с.
3. Л.Г. Коренева, В.Ф. Золин, Б.Л. Давыдов Нелинейная оптика молекулярных кристаллов. М.: Наука, 1985. – С.200.
4. Characterization techniques and Tabulations for organic NLO materials / Ed.: M.G. Kuzyk, C.W. Dirk. – Marcel Dekker, Inc., 1998, 912 p.
5. P.A. Sullivan, L.R. Dalton. Theory-Inspired Development of Organic Electro-optic Materials. Acc. Chem. Res., 2009
6. L.R. Dalton, P.A. Sullivan, D.H. Bale. Electric Field Poled Organic Electro-optic Materials: State of the Art and Future Prospects. *Chem. Rev.* **2010**, *110*, 25–55
7. Х.Д. Хельтье, В. Зиппль, Д. Роньян, Г. Фолькерс. Молекулярное моделирование. Теория и практика. М.: БИНОМ. Лаб. знаний, 2013, 319 с.
8. Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров. Отв. Ред. В.А. Иванов, А.Л. Рабинович, А.Р. Хохлов. М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2009, 696 с.
9. Theodorou, D.N. "Understanding and predicting structure-property relations in polymeric materials through molecular simulations" *Mol. Phys.* **2004**, *102*, 147-166.
<http://dx.doi.org/10.1080/00268970310001640085>
10. P. Carsky, M. Urban. Ab Initio Calculations. Methods and applications in chemistry. Lecture notes in Chemistry. Berlin: Verlag, 1980. – V. 16. – P. 235.
11. П. Эткинс. Кванты: справочник концепций. М.: Мир, 1977, 496 с.
12. Н.Ф. Степанов Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, 2001, 519 с.
13. В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. Теория строения молекул (Электронные оболочки): М.: Высшая школа, 1997, 407 с.
14. С. Фудзинага. Метод молекулярных орбиталей. М.: Мир, 1983.
15. Р. Мак-Вини, Б. Сатклиф. Квантовая механика молекул. М.: Мир, 1972.
16. С. Уилсон. Электронные корреляции в молекулах. М.: Мир, 1987. – С.304.
17. Р. Бейдер. Атомы в молекулах. Квантовая теория. — М.: Мир, 2001. — 532 с.

18. А.В. Арбузников. Гибридные обменно-корреляционные функционалы и потенциалы: развитие концепции. Ж. структ. Химии, 2007, 48, 5-38.

19. R. Peverati, D.G. Truhlar. Quest for a universal density functional: the accuracy of density functionals across a broad spectrum of databases in chemistry and physics. Phil. Trans. R. Soc. A 372 (2014) 20120476.

Научный руководитель
д.х.н., зав. лабораторией
функциональных материалов
ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН

М.Ю. Балакина

Рецензент
д.х.н., профессор,
к.н.с. ИОФХ им. А.Е. Арбузова
КазНЦ РАН

С.А. Кацюба