

САМАРҚАНД ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ

“ТАСДИҚЛАЙМАН”

Самарқанд давлат
университети Ректори
Р.И.Халмурадов



[Handwritten signature]

“2” 04 2018 йил

“МАЪҚУЛЛАНДИ”

Ўзбекистон Республикаси
Вазирлар Маҳкамаси
Хузуридаги ОАК раиси
А.Т.Юсупов



[Handwritten signature]

“ ” 2018 йил

02.00.04-“Физик кимё” ихтисослиги бўйича
малакавий имтиҳон
ДАСТУРИ

Ўзбекистон Республикаси Олий аттестация комиссияси Раёсатининг
2018 йил “28” *май* №257/б сонли қарори билан тасдиқланган

ТОШКЕНТ – 2018

ФИЗИКАВИЙ КИМЁДАН ДАСТУР

Кимёвий термодинамика асослари. Асосий тушунчалар: термодинамик система, изоляцияланган, ёпиқ, очиқ, гомоген ва гетероген, узлуксиз системалар, термодинамик параметрлар, термодинамик жараёнлар: изобар, изотерм, адиабат, изохор, изобар-изотерм ва изохор-изотерм жараёнлар, қайтар ва қайтмас жараёнлар. Интенсив ва экстенсив катталиклар. Холат тенгламалари ва термик коэффициентлар: термик кенгайиш коэффициенти, босим ортишининг коэффициенти, изотермик сиқилиш коэффициенти. Термик коэффициентларнинг ўзаро боғланиши.

Газларнинг кинетик назариясининг асосий тенгламаси (Больцман тенгламаси). Газларнинг иссиқлик сиғими. Иссиқлик сиғимининг эркинлик даражаси билан боғлиқлиги.

Реал газлар. Ван-дер-Ваальс тенгламаси. Газларнинг конденсатланиши. Критик нукта. Буғ ва газ орасидаги фарқ. Келтирилган босим, ҳажм ва температуралар.

Кимёвий термодинамиканинг вазифаси. Феноменологик (классик) термодинамика, номувозанат жараёнларнинг термодинамикаси, статистик термодинамика.

Термодинамикани биринчи қонунининг таърифлари. Термодинамика биринчи қонунининг математик ифодаси, унинг интеграл, дифференциал ҳамда хусусий кўринишлари. Калорик коэффициентлар. Термодинамиканинг биринчи қонунини калорик коэффициентлар орқали ифодалаш.

Идеал газнинг турли жараёнлардаги кенгайиш иши, жараён иссиқлиги ва ички энергиянинг ўзгариши. Жоуль қонуни. Идеал газнинг адиабата тенгламаси. Пуассон тенгламалари. Энтальпия. Гесс қонуни ва ундан келиб чиқадиган хулосалар. Термокимё. Хосил бўлиш ва ёниш иссиқликлари. Иссиқлик сиғимининг ҳароратга боғлиқлиги. Реакция иссиқлик эффектининг ҳароратга боғлиқлиги. Кирхгоф тенгламаси.

Термодинамиканинг иккинчи қонуни ва унинг таърифлари: Томсон (Кельвин), Оствальд, Клаузиус, Каратеодори. Энтропия тушунчаси. Карно цикли. Фойдали иш коэффициенти. Қайтар жараёнлар учун термодинамиканинг иккинчи қонуни. Келтирилган иссиқлик ва унинг тўлиқ дифференциал эканлиги. Энтропия экстенсивлик фактори эканлиги. Изоляцияланган системаларда термодинамик жараённинг ўз-ўзича боришини, йўналиши ва чегарасини белгиловчи умумий кўрсаткич. Максимал иш тушунчаси. Энергиянинг диссипацияси. Энтропиянинг тартибсизлик ўлчови эканлиги.

Қайтмас жараёнлар учун термодинамиканинг иккинчи қонуни. Тўлиқ қайтмас жараёнлар. Қайтмас ўз-ўзидан боровчи жараёнлар учун изоляцияланган системада, изотермик қайтар жараёнлар ҳамда циклик қайтмас жараёнлар учун термодинамика иккинчи қонунининг ифодалари. Қайтар ва қайтмас жараёнлар учун термодинамика иккинчи қонунининг ифодаси. Термодинамика биринчи ва иккинчи қонунларининг умумлашган тенгламаси.

Термодинамиканинг 2-қонунини статистик асослаш. Больцман тенгламаси. Система ҳолатининг термодинамик эҳтимоллиги билан унинг энтропияси орасидаги боғланиш. Термодинамиканинг 1-қонуни абсолют қонун эканлиги ва термодинамиканинг 2-қонунининг статистик табиати. Флуктуациялар тушунчаси.

Турли жараёнларда энтропиянинг ўзгариши.

Термик ва калорик коэффициентлар орасидаги боғлиқлик.

Термодинамик потенциаллар. Хараактеристик функциялар. Изобарик-изотермик ва изохорик-изотермик потенциаллар. Гиббс ва Гельмгольц энергиялари. Гиббс- Гельмгольц тенгламалари. Кимёвий потенциал.

Кимёвий мувозанат. Массалар таъсири қонуни. Мувозанат константалари. Кимёвий реакциянинг изотерма тенгламаси (Вант-Гофф тенгламаси). Кимёвий реакциянинг изобарик ва изохорик тенгламалари. Кимёвий мойиллик. Реал системаларнинг термодинамикаси. Льюис-Рендалл постулоту. Учувчанлик (фугитивлик) ва активлик тушунчалари.

Термодинамиканинг учинчи қонуни. Нернстнинг иссиқлик теоремаси. Планк постулоту. Абсолют энтропия. Планк постулотидан келиб чиқадиган ҳулосалар. Абсолют нольга эриша олмаслик принципи. Мувозанат константасини Темкин ва Шварцман усулида ҳисоблаш. Нернстнинг иссиқлик теоремаси ва Планк постулотига асосланиб, термодинамик функцияларнинг стандарт қийматлари бўйича мувозанат константасини ҳисоблаш.

Статистик термодинамика. Микро ҳолат ва унинг тушунчалари. Макро- ва микро системалар. Устивор тақсимотлар. Фазавий фазо. Гиббснинг статистик ансамбли. Микро каноник, каноник ва катта каноник ансамбллар. Эргоидлик постулоту. Тенг априор эҳтимоллик постулоту. Мувозанат тақсимланиш функцияси ҳақидаги постулот. Гиббс парадокси. Г-фазода функцияларнинг тақсимланиши. Омега фазо ва μ -фазо. Максвелл-Больцман, Бозе-Эйнштейн ва Ферми-Дирак функцияларининг тақсимланиши. Термодинамик катталикларнинг статистик аналоглари. Ҳолатлар бўйича йиғинди ва унинг хоссалари. Энтропия термодинамикада ва статистикада.

Газ, суюқлик ва кристалларнинг статистик ҳисоблари. Илгариланма, айланма, тебранма харакатларнинг ҳолатлар бўйича йиғиндиси ва термодинамик функциялари. Тенг тақсимланиш теоремаси. “Музлатилган” эркинлик даражалари. Иссиқлик сифимини статистик талқини. Мувозанат доимийсини назарий ҳисоблаш. Идеал ва реал газларнинг статистик термодинамикаси. Ячейкалар усули. Суюқликлар ва суюқ эритмаларнинг панжарали назариялари. Тақсимланиш функцияларининг корреляцион усули. Кристалл панжараларнинг дефектлари. Ностехиоетрик бирикмалар. Ланжевеннинг ҳолатлари бўйича сумма. Ҳолатларнинг электронлар бўйича суммаси. Иссиқлик сифимининг статистик талқини. Мувозанат доимийсини назарий ҳисоблаш.

Чизиқлимас термодинамика. Қайтмас (номувозанат) жараёнларнинг термодинамикаси. Оқимлар. Умумлашган кучлар. Квазистационар,

стационар, экспоненциал кўринишда ўзгарувчи оддий ва лавинасимон жараёнлар. Оқим ва умумлашган куч орасидаги муносабат. Оқимни ҳаракатлантирувчи интензивлик факторлари. Иссиқлик оқимининг температура градиентига, масса оқимининг концентрация градиентига, электр оқимининг потенциал градиентига боғлиқлиги. Оқимларнинг ўзаро таъсири: термодиффузия, Дюфур эффекти, диффузион потенциал ва концентрацион кутбланиш. Оқимлар жараёнида система энтропиясининг ўзгариши. Энтропиянинг вақт бирлигида ортиши билан оқимлар ва умумлашган кучлар орасидаги боғланиш. Онзагернинг ўзаролик муносабати. Кинетик коэффицентларнинг симметриклик принципи. Компенсацияланмаган иссиқлик. Компенсацияланмаган иссиқлик ва кимёвий мойиллик. Энтропиянинг ташқи ва ички ўзгариши. Энтропиянинг ҳосил бўлиш тезлиги. Изоляцияланган системалар учун энтропиянинг тўлиқ ўзгариши.

Номувозанат жараёнлар термодинамикасининг ривожланиш босқичлари. Пригожин, Глансдорф, Казимир ва бошқа олимларнинг номувозанат жараёнлар термодинамикасининг усулларини чизиқли бўлмаган соҳага тадбиқ қилиши. Локал мувозанатлар ҳақидаги постулот. Компенсацияланмаган иссиқликнинг термодинамик функцияларнинг ўзгариши билан боғлиқлиги. Кимёвий ўзгарувчи, кимёвий мойиллик ва термодинамиканинг биринчи қонуни. Очиқ системалар учун термодинамиканинг биринчи қонуни.

Фазавий мувозанат. Фаза, компонент, компонентлар сони, эркинлик даражаси тушунчалари. Гиббснинг фазалар қоидаси. Системанинг вариантлиги. Системаларнинг синфланиши. Бир компонентли системалар учун фазалар қоидаси. Сув ва олтингугурт учун ҳолат диаграммалари. Буғланиш эгриси учун Клапейрон–Клаузиус тенгламасининг дифференциал ва интеграл кўринишлари. Биринчи ва иккинчи тур фазавий ўтишлар. Эренфест тенгламаси. Полиморф ўтишлар. Моно-ва энантиотроп фазавий ўтишлар. Физик-кимёвий анализ.

Икки компонентли системалар. Совуш ва ҳолат диаграммалари. Ҳолат диаграммаларининг турли кўринишлари: кимёвий таъсир бўлмаган ва қаттиқ эритма ҳосил қилмайдиган; кимёвий таъсир бўлмаган ва чексиз эрийдиган қаттиқ эритмалар ҳосил қилувчи; кимёвий таъсир бўлмаган ва чекли эрийдиган қаттиқ эритмалар ҳосил қилувчи; конгруэнт суюқланувчи барқарор кимёвий бирикмалар тутган (қаттиқ эритмалар ҳосил бўлмайдиган); инконгруэнт суюқланувчи беқарор кимёвий бирикмалар тутган системаларнинг ҳолат диаграммалари.

Икки компонентли системаларнинг ҳолат диаграммаларини анализ қилишда ликвидус, солидус чизиқлари, эвтектив нуқта, эвтектик таркибли суюқ қотишма, эвтектик температура, фигуратив нуқта, каннода чизиғи, конгруэнт ва инконгруэнт суюқланувчи кимёвий бирикмалар, сингуляр ва дистектик нуқталар, перитектик нуқта каби тушунчалар. Ричаг елка қоидаси.

Қаттиқ эритмалар. Изоморфизм тушунчаси.

Уч компонентли системалар. Уч компонентли системанинг таркибини ифодалашда Гиббс ва Розебум усуллари. Бир хил ионли ва эвтоникага эга бўлган икки туз эритмасининг ҳолат диаграммаси. Тузлар сув билан гидратлар ёки қўш тузлар, комплекс бирикмалар ёки қаттиқ эритмалар ҳосил қилувчи мураккаб ҳолат диаграммалари.

Эритмалар. Эритмалар. Концентрация. Эритмаларда молекулаларнинг ўзаро таъсири. Эритмаларнинг назарияси ҳақида. Кўп компонентли системалар термодинамикаси. Кимёвий потенциал. Парциал моляр қатталиқлар. Идеал газ эритмаларининг термодинамик функциялари. Идеал бўлмаган газ эритмалари. Эритма компонентларининг учувчанлиги. Газларнинг ўзаро эрувчанлиги.

Суюқ бинар эритмаларининг тўйинган буғ босими. Раул қонуни. Идеал эритмалар. Суюлтирилган эритмалар. Реал эритмалар. Раул қонунидан мусбат ва манфий четланадиган эритмалар. Суюқлик-буғ мувозанат диаграммаси. Коноваловнинг 1-қонуни. Фракциялаб хайдаш. Учмайдиган моддалар эритмасининг қайнаш температураси. Эбулиоскопия. Коноваловнинг 2-қонуни. Азеотроп эритмалар. Сув буғи билан хайдаш. Эритма компонентларининг активлиги. Аралашмайдиган иккита эритувчида модданинг тақсимланиш коэффициенти. Экстракция.

Суюқ эритмаларнинг газ ва қаттиқ моддалар билан мувозанати. Идеал газ эрувчанлиги. Газ эрувчанлигини температурага боғлиқлиги. Идеал қаттиқ моддаларнинг эрувчанлиги. Криоскопия. Қаттиқ эритмаларнинг ажралиши. Қаттиқ моддалар эрувчанлигини босимга боғлиқлиги. Осмотик босим. Осмотик босимнинг термодинамикаси. Реал эритмаларнинг айрим синфлари. Регуляр эритмалар. Атермал эритмалар. Полимер эритмалар. Полимерларнинг эрувчанлиги. Полимер эритмаларнинг назариялари: Флори-Хаггинс, Пригожин ва Пригожин-Паттерсон-Флори назариялари. Макромолекулаларнинг эритмалардаги конформацион ҳоссалари ва молекуляр характеристикалари.

Электрокимё. Электролит эритмаларнинг тузилишлари ҳақида тушунчалар. (Т.Гродгус, М.Фарадей, С Аррениус). Аррениус назарияси. Ионларнинг ўзаро таъсирини термодинамик нуқтаи назаридан ифодалаш. Фаоллик ва фаоллик коэффицентлари. Дебай-Хюккель назариясининг асосий эҳтимолликлари. Ион атмосферасининг потенциали. Электролитлар ҳақида замонавий тушунчалар. Солиштирма ва эквивалент электр ўтказувчанлик. Ионлар ҳаракатчанлиги ва Кольрауш қонуни. Ташиш сони. Оствальднинг суюлтириш қонуни. Кондуктометриқ титрлаш. Ионларнинг ҳаракатчанлиги, эквивалент электр ўтказувчанлик ва ташиш сонини Дебай-Хюккель-Онзагер назарияси асосида эритма таркибига боғлиқлигини талқини. Оксидланиш-қайтарилиш реакцияларини кимёвий ва электрокимёвий амалга ошириш усуллари. Электрокимёвий жараёнлар термодинамикаси. Мувозанатдаги электрокимёвий занжирлар ва уларнинг ЭЮК, Нернст ва Гиббс-Гельмгольц тенгламалари. Электрод потенциалининг ҳосил бўлиши. Диффузион ва оксидланиш-қайтарилиш потенциаллари. Концентрацион элементлар. Электродларни синфлаш. Стандарт электродлар.

ЭЮК ни аниқлаш усуллари. ЭЮК дан физик-кимёвий таҳлилда фойдаланиш. Металлар коррозияси.

Кимёвий кинетика. Кимёвий кинетика-кимёвий реакцияларнинг тезлиги ва механизми ҳақидаги фан. Унинг асосий тушунчалари. Кинетикани ўрганишнинг назарий ва амалий аҳамияти. Кинетик чизиқлар ва уларни тузиш усуллари. Гомо- ва гетероген реакцияларга массалар таъсири қонунини қўллаш. Дифференциал ва интеграл кинетик тенгламалар.

Реакцияларнинг тартиби ва молекулярлиги. Реакция тартибини топишнинг Оствальд-Ноес, Вант Гофф ва бошқа усуллари. Кимёвий реакцияларнинг тезлик доимийсини ҳисоблаш усуллари. Реакция тезлигига таъсир этувчи омиллар: реагентлар концентрацияси, стерик омил, ҳарорат, эритувчининг табиати, ион кучи.

Кимёвий реакцияларнинг кинетик жиҳатдан табақаланиши. Оддий ва мураккаб реакциялар. Оддий реакциялар кинетикаси, уларга мос келадиган кинетик тенгламаларни келтириб чиқариш. Аррениус тенгламаси. Фаолланиш энергияси ва уни ҳисоблаш усуллари.

Кинетиканинг назариялари: фаол тўқнашувлар назарияси. Бимолекуляр реакциялар. Бимолекуляр реакциялар кинетикаси. Мономолекуляр реакциялар кинетикаси. Ўтиш ҳолат назарияси (фаолланиш комплекси). Фаолланиш комплекси назариясининг статистик ва термодинамик талқини. Мураккаб реакциялар кинетикаси. Ёнма-ён ва кетма-кет кетадиган реакциялар кинетикаси. Фотокимёвий реакциялар кинетикаси. Фотокимёвий чиқиш. Ферментатив реакциялар кинетикаси. Мэхаэлс-Минтен тенгламаси.

Кимёвий динамика. Кимёвий динамиканинг экспериментал усуллари. Кимёвий динамикада тўлқин назарияси. Кимёвий динамикада квант-кимёвий таҳлил.

Молекуляр система “ички” динамикасининг классик ифодаланиши. Классик траекториялар. Молекуляр системаларнинг регуляр ва стохастик ҳаракати. Фазовий бўшлиқнинг мос соҳалари. Тўлқин пакетлар динамикаси. Квант ўтишлари ва релаксация жараёнларининг динамикаси. Турли тебранишлар ўртасида бўлғиқлик бўлганда молекулалар тебраниши ва уйғонувчи тебраниш релаксацияси. Юқори уйғонишда тебранма ҳаракат энергетик спектрлари структураси. Тебранувчи полиадлар ва ўтишлар динамикаси.

Молекула айланишининг динамикаси. Юқори уйғонишда айланма ҳаракат энергетик спектрлари структураси. Айданма ҳаракат потенциал сирти.

Катализ. Катализнинг таърифи ва унинг умумий хусусиятлари. Кимёвий ва биокимёвий реакцияларда, кимёвий маҳсулотлар ишлаб чиқаришда катализнинг ўрни ва аҳамияти. Саноат миқёсида қўлланиладиган асосий каталитик жараёнлар. Гетероген катализаторларни олиш усуллари: чўктириш, шимдириш, механик аралашмалар ва металл қотишмалар тайёрлаш.

Гомоген ва гетероген каталитик жараёнларнинг табақаланиши. Гомоген катализнинг назариялари ва механизмлари. Гомоген катализда

оралиқ бирикмалар. Гомоген катализнинг кинетикаси. Гомоген катализга мисоллар.

Гетероген катализ. Гетероген каталитик реакцияларнинг асосий босқичлари. Гетероген катализаторлар юзасидаги фаол марказларнинг мавжудлиги ҳақидаги тасаввурлар ва уларнинг табиати. Гетероген катализдаги оралиқ бирикмалар. Гетероген каталитик реакцияларда адсорбциянинг ўрни. Катализаторлар иштирокидаги гетероген реакцияларнинг механизмлари. Адсорбилаш қобилиятига қараб катализаторларнинг фаоллигини аниқлаш.

Катализаторларнинг асосий тавсифлари: фаоллиги, селективлиги (танлаб таъсир қилиши), унумдорлиги, регенерация қилишга қобилияти, солиштирма юзаси. Кимёвий реакцияларнинг селективлиги бўйича бошқаришнинг умумий ёндашувлари.

Гетероген катализдаги фаоллантирувчилар ва заҳарлар ҳақидаги тушунчалар. Қайтар ва қайтмас заҳарланишлар. Каталитик заҳарлар вазифасини бажарадиган турли синфларга кирувчи бирикмалар.

Молекуляр механика. Кимёвий илмий-текшириш ишларида компьютерларни қўллаш. Компьютер тизимларини асосий кўрсаткичлари ва иш жойни ташкил қилиш. Куч майдонлари ёрдамида молекуляр моделлаштириш услублари. Молекуляр Механика ММП2 (Эленджер механикаси). Эмпирик услублар билан ишлашнинг асосий қоидалари, Молекуляр тузилишни ҳисоблаш учун вазифани ва ҳисоблаш баённомаларни расмийлаштириш. Молекуляр механика услуги билан намунавий кимёвий масалалар ечиш: молекуланинг реакцион траекторияси, энергиялари, зарядлари ва бошқа тавсифларини ҳисоблаш.

Ярим эмпирик услуги. Квант кимёси – молекуляр системалар қарашларида асосий постулат ва принциплар. Молекуляр орбиталларнинг сифатий назарияси. Квант кимёси услублари билан молекуляр структураларни кўрсатиш, Z-матрицаларни аниқлаш, молекуляр системаларнинг электрон, спектрал ва бошқа тавсифларини график ёрдамида ифодалаш. Кимёвий масалаларнинг ярим-эмпирик услублари ёрдамида ечилиши. Компьютер учун масалалар тузиш ва уларнинг ечимлари баённомалари билан ишлаш.

Ab initio услуги. Ab initio – ноэмпирик квант кимёвий ҳисоблаш услуги. Базисли функцияларни танлаш қоидалари. Замонавий интегрирланган ҳисоблаш дастурлари пакети. Масала ечишнинг тегишли услубни танлаб олиш. Масала ва унинг параметрларини тузишнинг асосий қоидалари.

Ҳисоб услубларнинг амалиётда қўлланилиши. Кимёвий бирикмаларнинг электрон тузилиши ва хоссалари. Кимёвий масалалар ечишнинг асосий қоидалари ва амалий кўрсатмалари шарҳи. Табиий бирикмаларнинг QSAR таҳлили.

**Фойдаланиладиган асосий дарсликлар ва ўқув
кўлланмалар рўйхати**

1. Howard Devoe Thermodynamics and chemistry.//A.P.Ch.E.University of Maryland, 2015, 504 p.
2. Акбаров Х.И., Тиллаев Р.С., Саъдуллаев Б.У. “Физикавий кимё”. “Университет”, 2014, 436 бет.
3. Anatol Malijevsky Physical Chemistry in brief, Institute of Chemistry, Prague, 2005, 466 p.
4. Усмонов Х.У., Рустамов Х.Р., Рахимов Х.Р. Физик химия. Т: “Ўқит.”,
5. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия. М. “Химия”: 2002.
6. Дамаскин Б.Б., Петрий О.А. Электрохимия: Учеб.пособие М: «Высшая школа», 1978. 296 с.
7. Статистик термодинамика: Ўқ.кўл. Б.У.Сагдуллаев, Тошкент, 1990.
8. Luisa Filippini and Duncan Sutherland “Nanotechnologies: principles, applications, implications and hand-on activities. 2013.
9. William M. Davis. Physical Chemistry a modern introduction. CRC Press, 2012.
10. Don Shilly. Essential of Physical Chemistry, CRC Press, 2012.
11. Эмануэль Н.М., Кноре Д.Г. Курс химической кинетики. М.: “Высшая школа”, 1984.
12. Смирнова Е.А. Курс статистической термодинамики в физической химии: Учеб.пособие 2-е изд. М: «Высшая школа», 1982. 456 с.
13. Rogers D. W. Computational chemistry using the PC. – John Wiley & Sons, 2003. – 363 p.
14. Cramer C. J. Essentials of computational chemistry: theories and models. – John Wiley & Sons, 2013. – 607 p.
15. Jensen F. Introduction to computational chemistry. – John Wiley & Sons, 2007. – 620 p.
16. Gilbert A. Introduction to Computational Quantum Chemistry: Theory //University Lecture. – 2007. – 101 p.
17. Muhamadiyev N.Q. Kimyoviy birikmalar tuzilishi va xossalari matematik modellash (o’quv qo’llanma)/ O’zbekiston Respublikasi Oliy va o’rta maxsus ta’lim vazirligi. – Toshkent: Cho’lpon nomidagi NMIU, 2016. - 264 bet.
18. Соловьев М.М., Соловьев М.Е. Компьютерная химия. М.: Изд. Солон, 2005.–536с.
19. Эберт К., Эдерер Х. Компьютеры. Применение в химии. М.: Мир, 1988. - 416 с.
20. Кларк Т. Компьютерная химия. М. Мир: 1990.
21. ЭВМ помогает химии. /Под ред. Г. Вернера, М. Шанона. Л.: Химия, 1990.- 384 с.
22. Математические методы и ЭВМ в аналитической химии: Сб. науч. тр. /Отв. ред. Л.А. Грибов. М.: Наука, 1989. – 300с.

23.Репинская И.Б. Ретросинтетический подход к планированию синтеза органических соединений. Новосибирск: Изд-во НГУ, 1989.

24.Бутырская Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView. – М.: Салон пресс, 2011. - 224 с.

Интернет ресурслар:

1. <http://www.chem.msu.ru>
2. <http://www.rushim.ru>
3. <http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS>
4. <http://www.ziyonet.uz>
5. <http://www.gaussian.com/>
6. <http://www.kjemi.uio.no/software/dalton/dalton.html>
7. <http://www.emsl.pnl.gov/docs/nwchem/nwchem.html>
8. <http://www.hyper.com/>
9. http://www.qchem.ru/d/lect/khsl_qchem/20Lecture-19.pdf
10. [/GAMESS.html](#)