

### **Программа вступительного экзамена**

при приеме на обучение по образовательным программам высшего образования – программам подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре

по дисциплине:

### **ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА, ГОРЕНИЕ И ВЗРЫВ, ФИЗИКА ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ ВЕЩЕСТВА**

#### *1. Пояснительная записка*

Программа вступительного экзамена при приеме на обучение по образовательным программам высшего образования – программам подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре по химической физике разработана в соответствии с государственными образовательными стандартами высшего образования уровней *специалист, магистр*.

Цель испытаний – определить способность поступающих использовать теоретические основы разделов химической физики при решении профессиональных задач.

Вступительный экзамен по специальной дисциплине проводится в устной форме по вопросам программы. Поступающим предлагаются два основных вопроса из программы, на подготовку ответов отводится один час, тезисы ответа записываются поступающими на бланках ответа. Помимо основных вопросов члены комиссии могут задать поступающим дополнительные вопросы, не требующие длительной подготовки.

#### *2. Программа вступительных испытаний*

##### **Строение вещества**

1. Основы квантовой теории многоэлектронных систем. Адиабатическое приближение Борна Оппенгеймера. Операторы момента импульса. Уровни энергии. Основные принципы теории валентности.
2. Электронное строение молекул. Метод молекулярных орбиталей и его применение к двухатомным молекулам. Молекулярные орбитали гомоядерных двухатомных молекул. Гетероядерные двухатомные молекулы.
3. Гибридизация атомных волновых функций. Метод молекулярных орбиталей в приближении Хюккеля применительно к молекулам с сопряженными связями.
4. Электронное строение координационных соединений. Межмолекулярное взаимодействие. Теория кристаллического поля. Спин-орбитальное взаимодействие.

5. Строение и свойства твердого тела. Колебания и волны в одномерной решетке. Колебания атомов трехмерной кристаллической решетки.
6. Нормальные колебания. Электрон в периодическом поле. Зоны Бриллюэна. Структура энергетических зон. Локализованные состояния электронов в кристалле.
7. Условия возникновения ЯМР и ЭПР. Гамильтониан магнитных взаимодействий. Химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие в ЯМР. Сверхтонкая структура спектров ЭПР. Интерпретация тензоров сверхтонкого взаимодействия и  $g$ -тензора.

### **Основы молекулярной фотоники**

1. Электронная структура молекул. Возбужденные состояния. Спектры поглощения и люминесценции. Флуоресценция и фосфоресценция.
2. Теория и методы расчета электронно-колебательных спектров многоатомных молекул. Релаксация. Безызлучательные электронные переходы. Неадиабатическое взаимодействие. Перенос заряда.
3. Законы фотохимии. Классификация фотохимических реакций. Фотохимическая кинетика.
4. Методы оптической (в том числе нелинейной) спектроскопии: адсорбционные, флуоресцентные, поляризационные, комбинационного рассеяния.

### **Динамика атомов и молекул**

1. Химическая термодинамика и равновесие. Равновесное распределение молекул идеального газа. Распределение Максвелла и распределение Больцмана. Распределение Бозе и Ферми. Статистика Гиббса. Термодинамические свойства идеальных газов.
2. Элементарные атомно-молекулярные процессы. Поверхность потенциальной энергии для системы трех атомов.
3. Мономолекулярные реакции. Механизм активации молекул.
4. Обмен энергии при молекулярных столкновениях. Превращение поступательной, вращательной и колебательной энергий при столкновениях. Кинетические уравнения для заселенностей уровней энергии (в том числе при наличии химических реакций).
5. Взаимодействие электронов с атомами и молекулами. Фотоионизация. Рекомбинация электронов и атомов.

### **Основы химической кинетики**

1. Механизм и скорость химической реакции. Закон действующих масс. Порядок реакции. Константа скорости. Закон Аррениуса.
2. Химические реакции в жидкой фазе. Роль среды в элементарном акте химической реакции. Индуцированные и гомогенно-каталитические реакции. Сопреженные реакции.

3. Гетерогенный катализ. Равновесие и кинетика адсорбции на однородных и неоднородных поверхностях.

### **Основы синергетики**

1. Проблема порядка и беспорядка в структуре материи. Динамика и информация. Проблема необратимости. Динамический хаос. Диссипативные динамические системы.
2. Неравновесные фазовые переходы. Самоорганизация. Генерация когерентного излучения в лазере как пример неравновесного фазового перехода.
3. Пространственно-временные диссипативные структуры в химии. Реакция Белоусова-Жаботинского.

### **Химическая физика горения и взрыва**

1. Теория процессов горения. Уравнения теплопроводности и диффузии в химически реагирующей среде. Теория и критерий теплового взрыва. Цепной взрыв. Пределы цепного взрыва.
2. Горение твердых и жидких веществ в окислительной атмосфере. Горение летучих и нелетучих взрывчатых веществ, порохов, смесей горючего с окислителем. Физика нестационарного горения.
3. Горение жидких взрывчатых веществ. Горение пористых зарядов взрывчатых веществ и порохов. Фильтрационное горение
4. Ударные волны и детонация. Понятие простой волны. Ударные волны. Уравнения сохранения массы, импульса и энергии на фронте ударной волны.
5. Современная теория детонации. Правило отбора скорости стационарной детонации. Структура детонационной волны. Устойчивость детонационных волн. Пределы детонации. Современные методы решения задач физики горения и взрыва.

### **3. Критерии оценки знаний**

<b>Отлично</b>	Демонстрирует глубокие, специализированные знания по материалам дисциплины
<b>Хорошо</b>	Знает материал дисциплины, но допускает некоторые ошибки
<b>Удовлетворительно</b>	Демонстрирует фрагментарное, не систематическое знание материала дисциплины
<b>Неудовлетворительно</b>	Не имеет знаний по материалам дисциплины

Минимальное количество баллов, подтверждающее успешное прохождение вступительного испытания

- при поступлении в рамках контрольных цифр – *хорошо*
- при поступлении по договорам об оказании платных образовательных услуг – *удовлетворительно*

#### 4. Рекомендуемая литература

1. Бахман Н.Н., Беляев А.Ф. Горение гетерогенных конденсированных систем. М.: Наука, 1967.
2. Бучаченко А.Л., Сагдеев Р.З., Салихов К.М. Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях. Новосибирск: Наука, 1978.
3. Вилунов В.Н. Теория зажигания конденсированных веществ. М.: Наука, 1984.
4. Герцберг Г. Спектры и строение простых свободных радикалов. М.: Л., Физматгиз, 1962.
5. Денисов Е.Т., Саркисов О.М., Лихтенштейн Т.П. Химическая кинетика. М.: Химия, 2000.
6. Замараев К.И., Молин Ю.Н., Салихов К.М. Спиновой обмен. Теория и физико-химические приложения. Новосибирск, 1977.
7. Зельдович Я.Б., Компанеец А.С. Теория детонации. М.: ГТТИ, 1955.
8. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
9. Керрингтон Н., Мак-Лечлан Э. Магнитный резонанс и его применение в химии. М.: Мир, 1970.
10. Кондратьев В.Н., Никитин Е.Е. Кинетика и механизм газофазных реакций. М.: Наука, 1974.
11. Курант Р., Фридрикс Н. Сверхзвуковые течения и ударные волны. М.: Изд-во иностр. лит., 1950.
12. Льюис Б., Эльбе Г. Горение, пламя и взрывы в газах. М.: Мир, 1968.
13. Маррсл Дж., Кетти С., Теддер Дж. Теория валентности. М.: Мир, 1968.
14. Математическая теория горения и взрыва / Я.Б. Зельдович, Т.П. Баренблатт, В.Б. Либрович, Г.М. Махвиладзе. М.: Наука, 1980.
15. Новожилов Б.Н. Нестационарное горение твердых ракетных топлив. М.: Наука, 1973.
16. Переход горения конденсированных систем и взрыв / А.Ф. Беляев, В.К. Боболев и др. М.: Наука, 1973.
17. Похил П.Ф., Мальцев В.М., Зайцев В.М. Методы исследования процессов горения и детонации. М.: Наука, 1969.
18. Семенов Н.Н. О некоторых проблемах химической кинетики и реакционной способности. М.: Изд-во АН СССР, 1958.
19. Термическое разложение и горение взрывчатых веществ и порохов / Г.Б. Манелис, Г.М. Назин, Ю.И. Рубцов, В.А. Струнин. М.: Наука, 1996.
20. Ударно-волновые явления в конденсированных средах / Т.Н. Канель, С.В. Разоренов, А.В. Уткин, В.Е. Фортов. М.: Янус-К, 1996.
21. Физика взрыва / Ф.А. Баум, Л.П. Орленко, К.П. Станюкович и др. М.: Наука, 1975.
22. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1987.
23. Химические лазеры / А.С. Башкин, В.И. Игошин, А.Н. Ораевский, В.А. Щеглов. М.: Наука, 1982.
24. Щелкин К.И., Трошин Я.К. Газодинамика горения. М.: Изд-во АН СССР, 1963.
25. Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики. М.: Высш. школа, 1974.