

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

УТВЕРЖДАЮ



И.о. декана физического
факультета МГУ

/ В.В. Белокуров /

«21» марта 2024г.

ПРОГРАММА-МИНИМУМ

КАНДИДАТСКОГО ЭКЗАМЕНА ПО СПЕЦИАЛЬНОСТИ

**1.3.17 Химическая физика, горение и взрыв,
физика экстремальных состояний вещества**

Шифр и наименование области науки

1. Естественные науки

Наименование отраслей науки, по которым присуждаются ученые степени

Физико-математические науки

Москва 2024

Москва 2024

I. Описание программы

Программа-минимум кандидатского экзамена, разработана Физическим факультетом Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова на основе паспорта научной специальности, утвержденного Высшей аттестационной комиссией при Министерстве науки и высшего образования Российской Федерации, и учебного плана программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре по специальности 1.3.17 Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества в отрасли физико-математических наук.

II. Основные разделы и вопросы к экзамену

Тема 1. Строение вещества

Основы квантовой теории многоэлектронных систем. Адиабатическое приближение Борна-Оппенгеймера. Свойства симметрии многоэлектронной волновой функции. Уровни энергии. Основные принципы теории валентности. Электронное строение молекул. Метод молекулярных орбиталей и его применение к двухатомным молекулам. Молекулярный ион водорода и молекула водорода. Молекулярные орбитали гомоядерных двухатомных молекул. Гетероядерные двухатомные молекулы. Правило пересечения потенциальных кривых. Понятие о методе самосогласованного поля. Гибридизация атомных волновых функций. Межмолекулярное взаимодействие. Силы Ван-дер-Ваальса. Донорно-акцепторные комплексы. Водородная связь. Строение и свойства твердого тела. Природа сил взаимодействия в кристаллах. Колебания и волны в одномерной решетке. Зоны Бриллюэна.

Тема 2. Основы молекулярной фотоники

Электронная структура молекул. Возбужденные состояния. Поглощение и испускание света. Спектры поглощения и люминесценции. Флуоресценция и фосфоресценция. Теория и методы расчета электронно-колебательных спектров многоатомных молекул. Приближения Франка-Кондона и Герцберга-Теллера. Законы фотохимии. Классификация фотохимических реакций. Фотодиссоциация. Фотоприсоединение. Фотозамещение и фотоперегруппировка. Фотохимические окислительно-восстановительные реакции. Фотохимическая кинетика. Методы оптической (в том числе нелинейной) спектроскопии: адсорбционные, флуоресцентные, поляризационные, комбинационного рассеяния.

Тема 3. Динамика атомов и молекул

Химическая термодинамика и равновесие. Равновесное распределение молекул идеального газа. Распределение Максвелла и распределение Больцмана. Распределение Бозе и Ферми. Статистика Гиббса. Термодинамические свойства идеальных газов. Флуктуации. Равновесие фаз. Слабые растворы. Химические равновесия. Поверхностные явления. Элементарные атомно-молекулярные процессы. Упругие столкновения атомов. Полное и дифференциальное сечения рассеяния. Неупругие столкновения. Вероятности переходов, сечения и константы скорости прямых и обратных процессов. Метод переходного состояния.

Мономолекулярные реакции. Механизм активации молекул. Сильные столкновения и ступенчатое возбуждение. Обмен энергии при молекулярных столкновениях. Превращение поступательной, вращательной и колебательной энергий при столкновениях. Релаксация по поступательным, вращательным и колебательным степеням свободы. Кинетические уравнения для заселенностей уровней энергии (в том числе при наличии химических реакций). Взаимодействие электронов с атомами и молекулами. Возбуждение атомов и молекул электронным ударом. Ионизация атомов и молекул электронным ударом. Фотоионизация. Рекомбинация электронов и атомов.

Тема 4. Основы химической кинетики

Механизм и скорость химической реакции. Закон действующих масс. Порядок реакции. Константа скорости. Закон Аррениуса. Кинетика сложных реакций. Обратимые, последовательные, параллельные процессы. Прямая и обратная кинетическая задача. Метод квазистационарных концентраций. Лимитирующая стадия сложного химического процесса. Кинетика химических реакций в открытых системах. Стационарные режимы.

Цепные реакции. Зарождение, продолжение и обрыв цепей. Длина цепи. Линейный и квадратичный обрыв цепей, обрыв цепей на стенках. Влияние диффузии на скорость цепного процесса. Ингибирование цепных реакций. Разветвленные цепные реакции. Предельные явления, полуостров воспламенения. Реакции с вырожденным разветвлением цепей. Химические лазеры. Гетерогенный катализ. Равновесие и кинетика адсорбции на однородных и неоднородных поверхностях. Изотерма адсорбции Лэнгмюра. Хемосорбция. Моно- и полимолекулярные слои адсорбатов на поверхности. Ингибирование и конкуренция реакций на поверхности. Механизмы гетерогенного катализа.

Тема 5. Основы синергетики

Проблема порядка и беспорядка в структуре материи. Динамика и информация. Проблема необратимости. Динамический хаос. Диссипативные динамические системы. Параметр порядка в критических явлениях и фазовых переходах. Теория фазовых переходов первого и второго рода.

Пространственно-временные диссипативные структуры в гидродинамике и химии. Ячейки Бенара. Реакция Белоусова-Жаботинского.

Тема 6. Химическая физика горения и взрыва

Теория процессов горения. Уравнения теплопроводности и диффузии в химически реагирующей среде. Теория и критерий теплового взрыва. Цепной взрыв. Пределы цепного взрыва.

Теория и закономерности стационарного горения газовой смеси. Нормальная скорость распространения пламени. Пределы распространения пламени, предельный диаметр и предельная концентрация компонентов смеси. Диффузионно-тепловая неустойчивость пламени. Представление о турбулентном горении. Холодные пламена. Горение неперемешанных газов.

Ударные волны и детонация. Система уравнений газовой динамики для одномерных движений в координатах Лагранжа и Эйлера. Характеристики, инварианты Римана. Понятие простой волны. Ударные волны. Уравнения

сохранения массы, импульса и энергии на фронте ударной волны. Уравнения состояния газа и конденсированных сред. Ударная адиабата, изоэнтропы, их взаимное расположение. Ударные волны в реагирующих и релаксирующих средах. Взаимодействие волн - распады разрывов, затухание ударных волн.

Современная теория детонации. Правило отбора скорости стационарной детонации. Структура детонационной волны. Устойчивость детонационных волн. Методы измерения основных параметров детонации. Современные методы решения задач физики горения и взрыва.

Тема 7. Физика экстремальных состояний вещества.

Понятие вещества в экстремальном состоянии. Примеры экстремальных состояний вещества в природе, технике и лаборатории.

Физические свойства вещества при экстремально высоких давлениях и температурах. Методы генерации интенсивных импульсных потоков энергии, эффекты взаимодействия мощных ионных и электронных пучков, лазерного, рентгеновского и СВЧ излучения с веществом.

Экспериментальные методы диагностики быстрых процессов и вещества в экстремальных состояниях.

III. Критерии оценивания

Критерии и показатели оценивания ответа на экзамене			
Неудовлетворительно	Удовлетворительно	Хорошо	Отлично
Фрагментарные знания в области химической физики, горения и взрыва, физики экстремальных состояний вещества	Неполные знания в области химической физики, горения и взрыва, физики экстремальных состояний вещества	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания в области химической физики, горения и взрыва, физики экстремальных состояний вещества	Сформированные и систематические знания в области химической физики, горения и взрыва, физики экстремальных состояний вещества

IV. Рекомендуемая основная литература

1. Фортов В.Е. Экстремальные состояния вещества. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. — 304 с. — ISBN 978-5-9221-1104-1.
2. Физика взрыва / Ф.А. Баум, Л.П. Орленко, К.П. Станюкович и др. М.: Наука, 1975.
3. Маррел Дж., Кетти С., Теддер Дж. Теория валентности. М.: Мир, 1968.
4. Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики. М.: Высш. школа, 1974.

5. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1987.
6. Денисов Е.Т., Саркисов О.М., Лихтенштейн Г.И. Химическая кинетика. М.: Химия, 2000.
7. Термическое разложение и горение взрывчатых веществ и порохов / Г.Б. Манелис, Г.М. Назин, Ю.И. Рубцов, В.А. Струнин. М.: Наука, 1996.
8. Математическая теория горения и взрыва / Я.Б. Зельдович, Г.И. Баренблатт, В.Б. Либрович, Г.М. Махвиладзе. М.: Наука, 1980.
9. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. Физматгиз 2008 652 стр. ISBN:978-5-9221-0938-3
10. Сысоев Н.Н., Селиванов В.В., Хахалин А.В. Физика горения и взрыва: учебное пособие : в 3 частях / Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Физический факультет. - Москва : Изд-во Физического фак. МГУ им. М. В. Ломоносова, 2017.

V. Рекомендуемая дополнительная литература

1. Керрингтон Н., Мак-Лечлан Э. Магнитный резонанс и его применение в химии. М.: Мир, 1970.
2. Химические лазеры / А.С. Башкин, В.И. Игошин, А.Н. Ораевский, В.А. Щеглов. М.: Наука, 1982.
3. Замараев К.И., Молин Ю.Н., Салихов К.М. Спиновой обмен. Теория и физико-химические приложения. Новосибирск, 1977.
4. Льюис Б., Эльбе Г. Горение, пламя и взрывы в газах. М.: Мир, 1968.
5. Похил П.Ф., Мальцев В.М., Зайцев В.М. Методы исследования процессов горения и детонации. М.: Наука, 1969
6. Кондратьев В.Н., Никитин Е.Е. Кинетика и механизм газофазных реакций. М.: Наука, 1974.
7. Курант Р., Фридрикс Н. Сверхзвуковые течения и ударные волны. М.: Изд-во иностр. лит., 1950.
8. Семенов Н.Н. О некоторых проблемах химической кинетики и реакционной способности. М.: Изд-во АН СССР, 1958.
9. Зельдович Я.Б., Компанеев А.С. Теория детонации. М.: ГТТИ, 1955.
10. Щелкин К.И., Трошин Я.К. Газодинамика горения. М.: Изд-во АН СССР, 1963.