

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

УТВЕРЖДАЮ

И.о. декана физического факультета МГУ,
профессор, д.ф.-м.н.



/ В.В. Белокуров /

21 » марта 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

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

Chemical physics, combustion and explosion, the physics of extreme states of matter

Программа (программы) подготовки
научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре
Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества
(103-01-00-1317-фмн)

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с Приказом по МГУ от 24 ноября 2021 года № 1216 «Об утверждении Требований к основным программам подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре, самостоятельно устанавливаемых Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова».

1. Краткая аннотация:

Название дисциплины: Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Цель изучения дисциплины – расширение и углубление знаний о современном состоянии и тенденциях развития в области химической физики, горения и взрыва, а также физике экстремальных состояний вещества.

2. Уровень высшего образования - подготовка кадров высшей квалификации.

3. Научная специальность: 1.3.17 Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества; область науки: естественные науки.

4. Место дисциплины (модуля) в структуре Программы аспирантуры: дисциплины (модули), направленные на подготовку к кандидатским экзаменам - Дисциплина, совпадающая с наименованием научной специальности.

5. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетных единицы, всего 108 часов, из которых 54 часа составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (54 часа занятия лекционного типа), 54 часа составляет самостоятельная работа учащегося.

6. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Необходимы знания высшей математики и общей физики в объеме курсов, преподаваемых на физических специальностях классических университетов, полученных на предыдущих уровнях высшего образования.

7. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы из них		
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка к коллоквиумам	Всего
Тема 1. Строение и электронная структура вещества <i>Основы квантовой теории многоэлектронных систем. Адиабатическое приближение Борна—Оппенгеймера. Основные принципы теории валентности. Электронное строение молекул. Метод молекулярных орбиталей и его применение к двухатомным молекулам. Молекулярный ион и молекула водорода. Молекулярные орбитали гомоядерных и гетероядерных двухатомных молекул. Силы Ван-дер-Ваальса. Донорно-акцепторные комплексы. Водородная связь.</i>	9	4					4	5		5

Строение и свойства твердого тела. Аморфные твердые тела. Жидкости.										
Тема 2. Динамика атомов и молекул Химическая термодинамика и равновесие.. 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. Метод переходного состояния. Неадиабатические процессы.	10	4					4	6		6
Тема 3. Обмен энергией при молекулярных столкновениях Обмен энергии при молекулярных столкновениях. Превращение поступательной, вращательной и колебательной энергий при столкновениях. Релаксация по поступательным, вращательным и колебательным степеням	10	4					4	6		6

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 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.	9	4					4	5		5
Тема 5. Основы молекулярной фотоники Электронная структура молекул. Возбужденные состояния. Поглощение и испускание света.	10	5					5	5		5

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 6. 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	9	5					5	4		4

концентраций. Лимитирующая стадия сложного химического процесса.										
Тема 7. Цепные реакции 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.	10	5					5	5		5
Тема 8. 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.	8	4					4	4		4
Тема 9. Процессы горения. Уравнения теплопроводности и диффузии в химически	10	5					5	5		5

реагирующей среде. Теория и критерий теплового взрыва. Цепной взрыв. Пределы цепного взрыва. Воспламенение и зажигание. Теория 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.										
Тема 10. 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. Современная теория детонации.	10	5					5	5		5

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 11. Физика экстремальных состояний вещества. Понятие вещества в экстремальном состоянии. Примеры экстремальных состояний вещества в природе, технике и лаборатории. Модели уравнений состояния вещества. Уравнение состояния Ми-Грюнайзена, Фазовые переходы. Переход жидкость-газ. Плавление. Фазовые диаграммы веществ. Теория Ландау переходов второго рода. Критические явления. 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	9	5					5	4		4

<i>диагностики быстрых процессов и вещества в экстремальных состояниях.</i>										
Промежуточная аттестация: допуск к кандидатскому экзамену	4					4				
Итого	108	50				4	54	54		54

8. Образовательные технологии

Используемые формы и методы обучения: лекции и семинарские занятия, самостоятельная работа аспирантов.

В процессе преподавания дисциплины преподаватель использует как классические формы и методы обучения (лекции и семинарские занятия), так и активные методы обучения.

При проведении лекционных занятий преподаватель использует при необходимости аудиовизуальные, компьютерные и мультимедийные средства обучения, а также демонстрационные и наглядно-иллюстрационные (в том числе раздаточные) материалы.

9. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю): аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и задания для самостоятельной работы, презентации к лекционным занятиям.

10. Ресурсное обеспечение:

Основная литература:

1. Фортов В.Е. Экстремальные состояния вещества. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009.
2. Баум Ф.А., Орленко Л.П., Станюкович К.П. и др. Физика взрыва / 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. Манелис Г.Б., Назин Г.М., Рубцов Ю.И., Струнин В.А. Термическое разложение и горение взрывчатых веществ и порохов / М.: Наука, 1996.
8. Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б., Махвиладзе Г.М. Математическая теория горения и взрыва / М.: Наука, 1980.
9. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. Физматгиз, 2008.
10. Сысоев Н.Н., Селиванов В.В., Хахалин А.В. Физика горения и взрыва: учебное пособие : в 3 частях / М.: Изд-во Физического фак. МГУ им. М. В. Ломоносова, 2017.

Дополнительная литература:

1. Керрингтон Н., Мак-Лечлан Э. Магнитный резонанс и его применение в химии. М.: Мир, 1970.
2. Башкин А.С., Игошин В.И., Ораевский А.Н., Щеглов В.А. Химические лазеры / М.: Наука, 1982.
3. Замараев К.И., Молин Ю.Н., Салихов К.М. Спиновой обмен. Теория и физико-химические приложения. Новосибирск, 1977.

11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватели:

1. Д.ф.-м.н., профессор Уваров Александр Викторович, uvarov@phys.msu.ru, +7(495)9392694;
2. К.ф.-м.н. доцент Винниченко Николай Аркадьевич, nickvinn@yandex.ru, +7(495)9392694.

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы домашних заданий:

1. Напишите уравнение электролитической диссоциации муравьиной кислоты и найдите концентрации ионов H^+ и $HCOO^-$ в моль/л в растворе, молярность которого равна 0.01, если константа диссоциации $K=1.8 \cdot 10^{-4}$.
2. Реакция $H_2 + Cl_2 = 2HCl$. Константа скорости реакции k . В начале — равное известное количество по молям водорода и хлора. Написать общее уравнение для изменения концентрации соляной кислоты и найти решение на первой стадии.
3. Толщина плоского слоя уменьшена в 3 раза. Во сколько раз можно увеличить разность температур, при которой еще не начинается термогравитационная конвекция?
4. Нарисовать параболу Кондона для двух одинаковых, но сдвинутых по вертикали потенциальных кривых.
5. Как соотносится число колебательных уровней в модели обрезанного осциллятора с их реальным числом?
6. Как связаны между собой постоянная ангармонизма и энергия диссоциации?
7. Какие типы диполь-дипольного взаимодействия необходимо учитывать для пары $H_2 - CO$ и почему?
8. Ударная волна распространяется в колебательно-возбужденном азоте с колебательной температурой 3000 К. При каком числе Маха за фронтом ударной волны не будет наблюдаться релаксационной зоны? Температура перед фронтом — 300 К.
9. Какова вероятность, что модуль скорости молекулы лежит в диапазоне от c_1 до c_2 ?
10. Известно, что при уменьшении коэффициента теплопередачи в 2 раза температура системы увеличилась с 600 К до 1200 К. Найти энергию активации в рамках теории Семенова, если температура окружающей среды равна 300 К.

Вопросы для промежуточной аттестации – зачета:

1. Молекулярные ионы инертных газов.
2. Донорно-акцепторная связь и ее основные отличия от ковалентной связи.
3. Метод МО ЛКАО и метод валентных схем – сравнительный анализ.
4. Переходный комплекс, энергия активации и теплота реакции.
5. Расчет равновесных концентраций в слабом растворе.
6. Максвелловское распределение по скоростям и закон Аррениуса.
7. Второе начало термодинамики в открытых и изолированных системах.
8. Неустойчивость в открытых системах и переход к диссипативным структурам.
9. Закон действующих масс и зависимость равновесных концентраций от давления.
10. Химические лазеры. Принцип работы. Примеры.
11. Константа скорости химической реакции. Расчет концентраций веществ при протекании реакции.
12. Электронно-возбужденные состояния. Параметры молекул в электронно-возбужденном состоянии.
13. Релаксация по поступательным, вращательным и колебательным степеням свободы на примере процессов в ударной волне.
14. Принцип Франка-Кондона и парабола Кондона.
15. Второе начало термодинамики, адиабаты Гюгонио и Пуассона.

16. Уравнение Ми-Грюнайзена.
17. Цепные реакции на примере горения водорода в кислороде.
18. Пределы распространения пламени в трубе с учетом тепловых потерь.
19. Скорость детонационной волны.
20. Расчет изменения параметров в зоне реакции за фронтом детонационной волны.

**Методические материалы
для проведения процедур оценивания результатов обучения**

Зачет проходит по билетам, включающем 2 вопроса. Уровень знаний аспиранта по каждому вопросу на «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». В случае если на все вопросы был дан ответ, оцененный не ниже чем «удовлетворительно», аспирант получает общую оценку «зачтено».

Шкала оценивания знаний, умений и навыков

Результат освоения дисциплины	Критерии оценивания знаний, умений и навыков			
	2/ не зачтено	3/ зачтено	4/ зачтено	5/ зачтено
Знания	Отсутствие знаний основных законов химической физики	В целом успешные, но не систематические знания основных законов химической физики	В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы знания основных законов химической физики	Успешные и систематические знания основных законов химической физики
Умения	Отсутствие умения применять знания основных законов химической физики для решения научных задач	В целом успешное, но не систематическое умение применять знания основных законов химической физики для решения научных задач	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение применять знания основных законов химической физики для решения научных задач	Успешное и систематическое умение применять знания основных законов химической физики для решения научных задач
Навыки	Отсутствие/фрагментарное владение навыками решения научных задач в области химической физики	В целом успешное, но не систематическое владение навыками решения научных задач в области химической физики	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы владение навыками решения научных задач в области химической физики	Успешное и систематическое владение навыками решения научных задач в области химической физики