

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования  
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

**ПРИНЯТО**

на заседании Приемной комиссии  
протокол № 7 от 26.03.2015 г.



**УТВЕРЖДАЮ**

Зам. председателя  
Приемной комиссии,  
директор по учебной работе,  
канд. филос. наук,  
М. В. Румянцев

**ПРОГРАММА**

вступительного испытания в аспирантуру  
Направление 03.06.01 «Физика и астрономия»  
Образовательная программа  
01.04.17 «Химическая физика, горение и взрыв,  
физика экстремальных состояний вещества»

Красноярск - 2015

## **Перечень вопросов по темам:**

### **1. Строение вещества.**

1.1. Основы квантовой теории многоэлектронных систем. Адиабатическое приближение Борна-Оппенгеймера. Свойства симметрии многоэлектронной волновой функции. Многоэлектронные атомы и периодическая система элементов. Уровни энергии. Основные принципы теории валентности.

1.2. Электронное строение молекул. Гибридизация атомных волновых функций. Межмолекулярное взаимодействие. Теория кристаллического поля. Комплексы со слабой и сильной связью. Спин-орбитальное взаимодействие. Силы Ван-дер-Ваальса. Донорно-акцепторные комплексы. Водородная связь.

1.3. Строение и свойства твердого тела. Природа сил взаимодействия в кристаллах. Нормальные колебания. Электрон в периодическом поле. Зоны Бриллюэна. Структура энергетических зон. Локализованные состояния электронов в кристалле.

1.4. Условия возникновения ЯМР и ЭПР. Возможности методов магнитного резонанса для исследования скоростей молекулярных и химических процессов.

### **2. Молекулярная фотоника.**

2.1. Электронная структура молекул. Возбужденные состояния. Поглощение и испускание света. Спектры поглощения и люминесценции. Флуоресценция и фосфоресценция. Законы фотохимии. Классификация фотохимических реакций. Фотодиссоциация. Фотоприсоединение. Методы оптической (в том числе нелинейной) спектроскопии: адсорбционные, флуоресцентные, поляризационные, комбинационного рассеяния.

### **3. Динамика атомов и молекул.**

3.1. Химическая термодинамика и равновесие. Равновесное распределение молекул идеального газа. Распределение Максвелла и распределение Больцмана. Распределение Бозе и Ферми. Статистика Гиббса. Термодинамические свойства идеальных газов. Химические равновесия. Поверхностные явления.

3.2. Элементарные атомно-молекулярные процессы. Упругие столкновения атомов. Полное и дифференциальное сечения рассеяния. Неупругие столкновения. Вероятности переходов, сечения и константы скорости прямых и обратных процессов. Неадиабатические процессы.

3.3. Мономолекулярные реакции. Механизм активации молекул.

3.4. Термический распад двухатомных молекул. Бимолекулярные реакции, идущие через образование промежуточного комплекса.

3.5. Обмен энергии при молекулярных столкновениях. Превращение

поступательной, вращательной и колебательной энергий при столкновениях. Релаксация по поступательным, вращательным и колебательным степеням свободы.

3.6. Взаимодействие электронов с атомами и молекулами. Возбуждение атомов и молекул электронным ударом. Ионизация атомов и молекул электронным ударом. Фотоионизация. Рекомбинация электронов и атомов.

#### **4. Основы химической кинетики**

4.1. 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. Кинетика химических реакций в открытых системах. Стационарные режимы.

4.2. Химические реакции в жидкой фазе. Роль среды в элементарном акте химической реакции. Влияние диффузии на скорость реакции. Влияние диэлектрической постоянной и ионной силы на скорости химических реакций в растворах. Влияние давления на скорость реакции. Влияние магнитного поля на скорость химической реакции.

4.3. Гетерогенный катализ. Равновесие и кинетика адсорбции на однородных и неоднородных поверхностях. Хемосорбция.

#### **5. Основы синергетики**

5.1. Проблема порядка и беспорядка в структуре материи. Динамика и информация. Проблема необратимости. Динамический хаос. Диссипативные динамические системы.

5.2. Неравновесные фазовые переходы. Вынужденный порядок в открытых физических системах. Принцип Пригожина-Гленсдорфа. Самоорганизация. Пространственные и временные диссипативные структуры. Генерация когерентного излучения в лазере как пример неравновесного фазового перехода.

#### **6. Химическая физика горения и взрыва**

6.1. Теория процессов горения. Уравнения теплопроводности и диффузии в химически реагирующей среде. Теория и критерий теплового взрыва. Цепной взрыв. Воспламенение и зажигание.

6.2. Теория и закономерности стационарного горения газовой смеси. Нормальная скорость распространения пламени. Пределы распространения пламени, предельный диаметр и предельная концентрация компонентов смеси. Представление о турбулентном горении.

6.3. Горение твердых и жидких веществ в окислительной атмосфере. Зажигание и горение частиц и капель горючего в окислительной среде. Горение летучих и нелетучих взрывчатых веществ, порохов, смесей горючего с

окислителем. Физика нестационарного горения. Условия перехода послойного горения на конвективный режим и во взрыв.

6.4. 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.

6.5. Современная теория детонации. Правило отбора скорости стационарной детонации. Структура детонационной волны. Устойчивость детонационных волн. Пределы детонации. Пределы возбуждения детонации. Особенности механизма энерговыведения в гомогенных и гетерогенных конденсированных веществах. Методы измерения основных параметров детонации.

#### **Список основных рекомендованных источников.**

1. Физика взрыва: В 2 т. под ред. Л.П. Орленко - 3-е изд., доп. и перераб. - М.: Физматлит, 2002.
2. Маррсл Дж., Кетти С, Теддер Дж. Теория валентности. М: Мир, 1968.
3. Герцберг Г. Спектры и строение простых свободных радикалов. - М.: Л., Физматгиз, 1962.
4. Физика взрыва / Ф.А. Баум, Л.П. Орленко, К.П. Станюкович и др. - М.: Наука, 1975.
5. Эмануэль Н. М., Кнорре Д. Г. Курс химической кинетики. - М.: Высш. школа, 1974.
6. Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. - М.: Наука, 1987.
7. Денисов Е. Т., Саркисов О. М., Лихтенштейн Г. И. Химическая кинетика. - М.: Химия, 2000.
8. Бучаченко А. Л., Сагдеев Р. З., Салихов К. М. Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях. - Новосибирск: Наука, 1978.
9. Термическое разложение и горение взрывчатых веществ и порохов / Г. Б. Манелис, Г. М. Назин, Ю. И. Рубцов, В. А. Струнин. - М.: Наука, 1996.
10. Математическая теория горения и взрыва / Я. Б. Зельдович, Г. И. Баренблатт, В. Б. Либрович, Г. М. Махвиладзе. - М.: Наука, 1980.
11. Переход горения конденсированных систем и взрыв / А. Ф. Беляев, В. К. Боболев и др. - М.: Наука, 1973.
12. Бахман Н. Н., Беляев А. Ф. Горение гетерогенных конденсированных систем. - М.: Наука, 1967.
13. Новожилов Б. Н. Нестационарное горение твердых ракетных топлив. - М.: Наука, 1973.
14. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и

высокотемпературных гидродинамических явлений. - М.: Наука, 1966.

15. Ударно-волновые явления в конденсированных средах / Г. И. Канель, С. В. Разоренов, А. В. Уткин, В. Е. Фортов. - М.: Янус-К, 1996.

### **Список дополнительных рекомендованных источников.**

1. Мержанов А. Г., Мукасян А. С. Твердопламенное горение. - М.: ТОРУС ПРЕСС, 2007.

2. Амосов А. П., Боровинская И. П., Мержанов А. Г. Порошковая технология самораспространяющегося высокотемпературного синтеза материалов. - М.: Машиностроение-1, 2007.

3. Даниленко В. В. Взрыв: физика, техника, технология. - М.: Энергоатомиздат, 2010.

4. Старостин В. В. Материалы и методы нанотехнологии. - М: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008.

5. Гусев А. И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007.

6. Сергеев Г. Б. Нанохимия. - М.: КДЦ, 2006.

7. Керрингтон Н., Мак-Лечлан Э. Магнитный резонанс и его применение в химии. - М.: Мир, 1970.

8. Химические лазеры / А. С. Башкин, В. И. Игошин, А. Н. Ораевский, В. А. Щеглов. - М.: Наука, 1982.

9. Замараев К. И., Молин Ю. Н., Салихов К. М. Спиновой обмен. Теория и физико-химические приложения. - Новосибирск, 1977.

10. Виллюнов В. Н. Теория зажигания конденсированных веществ. - М.: Наука, 1984.

11. Льюис Б., Эльбе Г. Горение, пламя и взрывы в газах. - М.: Мир, 1968.

12. Похил П. Ф., Мальцев В. М., Зайцев В. М. Методы исследования процессов горения и детонации. - М.: Наука, 1969

13. Кондратьев В. Н., Никитин Е. Е. Кинетика и механизм газофазных реакций. - М.: Наука, 1974.

14. Курант Р., Фридрикс Н. Сверхзвуковые течения и ударные волны. - М.: Изд-во иностр. лит., 1950.

15. Семенов Н. Н. О некоторых проблемах химической кинетики и реакционной способности. - М.: Изд-во АН СССР, 1958.

16. Зельдович Я. Б., Компанеев А. С. Теория детонации. - М.: ГТТИ, 1955.

17. Щелкин К. И., Трошин Я. К. Газодинамика горения. - М.: Изд-во АН СССР, 1963.

Составители программы:

А. И. Лямкин, д-р физ.-мат. наук, профессор,

В. П. Исаков, канд. физ.-мат. наук, доцент.

Программа соответствует паспорту номенклатуры специальностей научных работников.