

**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и  
медицинской химии Российской академии наук  
(ФИЦ ПХФ и МХ РАН)**

«Утверждаю»  
и.о. директора ФИЦ ПХФ и МХ РАН  
чл.-корр. РАН И.В. Ломоносов



**ПРОГРАММА-МИНИМУМ**  
кандидатского экзамена по научной специальности  
**1.3.17. Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных  
состояний вещества**  
по химическим, по физико-математическим наукам

Черноголовка 2023 г.

## **Введение**

В основу настоящей программы положены следующие дисциплины: строение и электронная структура вещества; динамика атомов и молекул; основы химической кинетики; основы молекулярной спектроскопии; химическая физика горения и взрыва; физика экстремальных состояний вещества.

Программа разработана на основе паспорта специальности 1.3.17. Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества, утвержденного приказом Минобрнауки РФ № 118 от 24.02.2021 г.

### **1. Строение и электронная структура вещества**

Основы квантовой теории многоэлектронных систем. Адиабатическое приближение Борна—Оппенгеймера. Свойства симметрии многоэлектронной волновой функции. Основное и возбужденное состояния атома гелия. Многоэлектронные атомы и периодическая система элементов. Операторы момента импульса. Уровни энергии. 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. Правило пересечения потенциальных кривых. Понятие о методе самосогласованного поля. Гибридизация атомных волновых функций. Метод молекулярных орбиталей в приближении Хюккеля применительно к молекулам с сопряженными связями.

Электронное строение координационных соединений. Межмолекулярное взаимодействие. Теория кристаллического поля. Комплексы со слабой и сильной связью. Спин-орбитальное взаимодействие. Применение метода молекулярных орбиталей к координационным соединениям. Эффект Яна—Теллера. Силы Ван-дер-Ваальса. Донорно-акцепторные комплексы. Водородная связь.

Строение и свойства твердого тела. Оптические и акустические фононы. Теплоемкость и теплопроводность кристаллов. Электрон в кристалле, зона

проводимости и запрещенная зона. Электропроводность металлов и полупроводников. Локализованные состояния электронов в кристалле. Аморфные твердые тела. Жидкости.

## **2. 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. Поверхность потенциальной энергии для системы трех атомов. Метод переходного состояния. Неадиабатические процессы. Мономолекулярные реакции. Механизм активации молекул. Сильные столкновения и ступенчатое возбуждение. Статистическая модель мономолекулярных реакций. Термический распад двухатомных молекул. Бимолекулярные реакции, идущие через образование промежуточного комплекса. Прямые бимолекулярные реакции: рикошетный механизм, механизм срыва, механизм прямого выбивания. Распределение энергии в бимолекулярных реакциях. 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.

### **3. 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. 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. Химические реакции в жидкой фазе. Влияние диффузии на скорость реакции. Клеточный эффект. Влияние диэлектрической постоянной и ионной силы на скорости химических реакций в растворах. Солевой эффект. Гомогенно-каталитические реакции. Автокатализ. Гетерогенный катализ. Коллоидная химия и наноструктуры. Фотохимические реакции. Фотодиссоциация. Фотоприсоединение. Фотозамещение и фотоперегруппировка. Фотохимические окислительно-восстановительные реакции. Основные понятия радиационной химии. Радиационно-химический выход. Элементарные процессы: ионизация и возбуждение, передача энергии, трековые эффекты. Реакции "сухого" и сольватированного электронов. Образование атомов и радикалов и их реакции. Пространственно-временные диссипативные структуры в химии. Реакция Белоусова—Жаботинского.

### **4. Основы молекулярной спектроскопии**

Электронная структура молекул. Возбужденные состояния. Поглощение и испускание света. Индуцированное и спонтанное излучение, лазеры. Формула Планка. Спектры поглощения и люминесценции. Флуоресценция и фосфоресценция. Правила отбора для вращательных, колебательных и электронных переходов. Теория и методы расчета электронно-колебательных спектров многоатомных молекул. Приближения Франка—Кондона и

Герцберга—Теллера. Комплексы с переносом заряда, эксимеры и эксиплексы. Безызлучательные электронные переходы.

## **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. 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. Ударные волны и детонация. 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.

## **7. Физика экстремальных состояний вещества**

Основные представления о поведении вещества в экстремальных условиях при высоких давлениях и температурах. Межчастичные взаимодействия. Кулоновское взаимодействие. Критерии неидеальности. Модели уравнений состояния вещества. Уравнение состояния Ми-Грюнайзена, Теория Томаса-Ферми. Фазовые переходы. Переход жидкость-газ. Плавление. Фазовые диаграммы веществ. Теория Ландау переходов второго рода. Критические явления. Термодинамика топологического беспорядка - физика жидкого состояния. Компьютерное моделирование свойств веществ в экстремальных условиях. «Химическая» модель ионизационного равновесия. Методы генерации экстремальных состояний вещества. Методы измерений реологических, термодинамических, оптических и электрофизических свойств.

## Основная литература:

- Маррсл Дж., Кетти С., Теддер Дж. Теория валентности. М.: Мир, 1968.
- Герцберг Г. Спектры и строение простых свободных радикалов. М.: Л., Физматгиз, 1962.
- Физика взрыва / Ф.А. Баум, Л.П. Орленко, К.П. Станюкович и др. М.: Наука, 1975.
- Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики. М.: Высш. школа, 1974.
- Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1987.
- Денисов Е.Т., Саркисов О.М., Лихтенштейн Г.И. Химическая кинетика. М.: Химия, 2000.
- Бучаченко А.Л., Сагдеев Р.З., Салихов К.М. Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях. Новосибирск: Наука, 1978.
- Термическое разложение и горение взрывчатых веществ и порохов / Г.Б. Манелис, Г.М. Назин, Ю.И. Рубцов, В.А. Струнин. М.: Наука, 1996.
- Математическая теория горения и взрыва / Я.Б. Зельдович, Г.И. Баренблатт, В.Б. Либрович, Г.М. Махвиладзе. М.: Наука, 1980.
- Переход горения конденсированных систем и взрыв / А.Ф. Беляев, В.К. Боболев и др. М.: Наука, 1973.
- Бахман Н.Н., Беляев А.Ф. Горение гетерогенных конденсированных систем. М.: Наука, 1967.
- Новожилов Б.Н. Нестационарное горение твердых ракетных топлив. М.: Наука, 1973.
- Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
- Ударно-волновые явления в конденсированных средах / Г.И. Канель, С.В. Разоренов, А.В. Уткин, В.Е. Фортов. М.: Янус-К, 1996.
- Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц, Статистическая физика. Часть 1. Москва, 1995.
- P.M. Chaikin, T.C. Lubensky, Principles of condensed matter physics. Cambridge Univ. Press, 1995.

### Дополнительная литература:

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

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

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

Вилунов В.Н. Теория зажигания конденсированных веществ. М.: Наука, 1984.

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

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

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

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

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

Зельдович Я.Б., Компанеец А.С. Теория детонации. М.: ГТТИ, 1955.

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

N. Goldenfeld. Lectures on phase transitions and the renormalization group. Perseus Books Publishing, L.L.C. 1992.

Daan Frenkel and Berend Smit, Understanding molecular simulation (From Algorithms to Applications), 2nd Edition (Academic Press), 2002.

Зам.директора ФИЦ ПХФ и МХ РАН  
к.х.н.



А.В. Казакова