

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ НАУЧНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ УФИМСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ЦЕНТР РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК**

РЕКОМЕНДОВАНО

И.о. директора ИФМК УФИЦ РАН



С.А. Пшеничнюк

«5» марта 2026 г.

УТВЕРЖДАЮ

Руководитель УФИЦ РАН



В.Б. Мартыненко

«6» марта 2026 г.

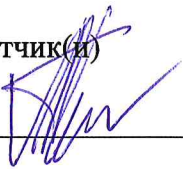
ПРОГРАММА

кандидатского экзамена по научной специальности

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

Программа составлена в соответствии с научной специальностью и отраслью науки, предусмотренными номенклатурой научных специальностей, по которым присуждаются учёные степени (утверждена Приказом Минобрнауки России от 24.02.2021 г. № 118).

Разработчик(и)

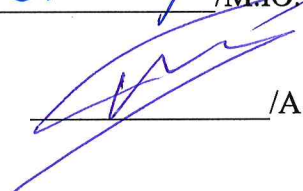

_____ д-р физ-мат. наук, С.А. Пшеничнюк

Согласовано:

Заведующий отделом аспирантуры УФИЦ РАН


_____ /М.Ю. Тимофеева

Ученый секретарь ИФМК УФИЦ РАН


_____ /А.А. Бунаков

1. Общие положения

Кандидатские экзамены являются основной частью аттестации научных и научно-педагогических кадров.

Цель экзамена - установить глубину профессиональных знаний аспиранта или прикрепленного лица (далее - соискатель ученой степени кандидата наук, соискатель), уровень подготовленности к самостоятельной научно-исследовательской работе.

Программа включает вопросы по разделам: строение веществ, основы молекулярной фотоники, динамика атомов и молекул, основы химической кинетики, основы синергетики, химическая физика горения и взрыва.

На экзамене кандидатского минимума по научной специальности 1.3.17. Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества соискатель ученой степени кандидата наук должен продемонстрировать владение методами решения задач физики, включая знание основных теорий и концепций всех разделов дисциплины. Он также должен показать умение использовать теории и методы физики для анализа современных проблем физики и избранной области предметной специализации.

От соискателя требуется четко, емко и кратко изложить теоретический материал, владеть соответствующей терминологией и проявить это в ответах.

При подготовке к кандидатскому экзамену и его сдаче в исключительных случаях (форс-мажор и т.п.) могут применяться электронное обучение, дистанционные образовательные технологии.

2. В результате освоения соискатель должен:

- знать: основные понятия и методы химической физики;
- уметь: формулировать задачи химической физики, применять математический аппарат химической физики, трактовать полученные результаты;
- владеть: представлениями об основных применениях химической физики, навыками решения конкретных физических задач;
- иметь опыт деятельности: постановке задач исследования в области химической физики.

3. Процедура кандидатского экзамена

Экзамен программы проводится по билетам, каждый из которых содержит 3 вопроса. Кроме того, на экзамене могут быть заданы дополнительные вопросы. Экзамен подразумевает также собеседование по содержанию полностью или частично подготовленного кандидатского исследования. За экзамен выставляется единая оценка.

4. Разделы, темы

В основу настоящей программы положены следующие дисциплины: Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества, Спектроскопия диссоциативного захвата электронов, Спектральные методы исследования для решения задач химической физики.

5. Вопросы кандидатского экзамена

1. Строение вещества

1. Основы квазигрупповой 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.

2. 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. Метод молекулярных орбиталей в приближении Хюккеля применительно к молекулам с сопряженными связями.

3. 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.

4. Строение и свойства твердого тела. Природа сил взаимодействия в кристаллах. Колебания и волны в одномерной решетке. Колебания атомов трехмерной кристаллической решетки. Нормальные колебания. Электрон в периодическом поле. Приближение слабо и сильно связанных электронов. Зоны Бриллюэна. Структура энергетических зон. Локализованные состояния электронов в кристалле.

5. Химическая радиоспектроскопия. Условия возникновения ЯМР и ЭПР. Времена релаксации и форма резонансной линии. Гамильтониан магнитных взаимодействий. Химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие в ЯМР. Сверхтонкая структура спектров ЭПР. Интерпретация тензоров сверхтонкого взаимодействия и g-тензора. Возможности методов магнитного резонанса для исследования скоростей молекулярных и химических процессов.

2. Основы молекулярной фотоники

1. 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. Потенциальные поверхности электронно-возбужденных состояний. Переходы между состояниями. Матричные элементы переходов. Релаксация. Взаимодействия в возбужденных состояниях, комплексы с переносом заряда, эксимеры и эксиплексы. Безызлучательные электронные переходы. Неадиабатическое взаимодействие. Перенос заряда. Перенос энергии электронного возбуждения. Индуктивно-резонансный механизм. Теория Ферстера-Декстера. Миграция возбуждения по донорам.

2. Законы фотохимии. Классификация фотохимических реакций. Фотодиссоциация. Фотоприсоединение. Фотозамещение и фотоперегруппировка. Фотохимические окислительно-восстановительные реакции. Фотохимическая кинетика.

3. Основные принципы конструирования избирательных супрамолекулярных систем. Фотоуправляемое комплексобразование. Фотоиницированные структурные и фазовые превращения. Кинетика тушения флуоресценции в микроэмульсиях. Методы оптической (в том числе нелинейной) спектроскопии: адсорбционные, флуоресцентные, поляризационные, комбинационного рассеяния. Место фотохимии в области развития современных технологий и средств техники.

3. 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. Флуктуации. Равновесие фаз. Слабые растворы. Химические равновесия. Поверхностные явления.

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. Поверхность потенциальной энергии для системы трех атомов. Метод переходного состояния. Неадиабатические процессы.

3. Мономолекулярные реакции. Механизм активации молекул. Сильные столкновения и ступенчатое возбуждение. Статистическая модель мономолекулярных реакций.

4. 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.

5. 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).

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

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. Метод квазистационарных концентраций. Лимитирующая стадия сложного химического процесса. Кинетика химических реакций в открытых системах. Стационарные режимы.

2. Химические реакции в жидкой фазе. Роль среды в элементарном акте химической реакции. Влияние диффузии на скорость реакции. Клеточный эффект. Влияние диэлектрической постоянной и ионной силы на скорости химических реакций в растворах. Солевой эффект. Влияние давления на скорость реакции. Объем активации. Соотношения структура - реакционная способность. Уравнения Гаммета и Тафта. Влияние магнитного поля на скорость химической реакции.

3. Индукированные и гомогенно-каталитические реакции. Сопряженные реакции. Фотохимические и радиационно-химические реакции. Механизм гомогенного катализа. Кинетика гомогенно-каталитических реакций. Кислотно-основной катализ. Зависимость скорости химической реакции от функции кислотности Гаммета. Ферментативный катализ. Уравнение Михаэлиса - Менгера. Катализ комплексами и ионами металлов переменной валентности. Автокатализ.

4. 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. Уравнения Лэнгмюра - Хиншельвуда и Ридила.

5. Основы синергетики

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

2. Параметр порядка в критических явлениях и фазовых переходах. Теория фазовых переходов первого и второго рода. Теория Ландау. Флуктуационная теория фазовых переходов. Гипотеза подобия. Скейлинговая теория критических показателей.

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

4. Пространственно-временные диссипативные структуры в химии. Реакция Белоусова-Жаботинского.

6. 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. Воспламенение и зажигание. Зажигание накаленной стенкой. Зажигание искрой. Очаговое воспламенение и минимальная энергия зажигания.

2. 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 перемешанных газов.

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.

4. Горение жидких взрывчатых веществ. Горение пористых зарядов взрывчатых веществ и порохов. Фильтрационное горение. Условия перехода послойного горения на конвективный режим и во взрыв.

5. 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. Современная теория детонации. Правило отбора скорости стационарной детонации. Структура детонационной волны. Устойчивость детонационных волн. Пределы детонации. Пределы возбуждения детонации. Принципы Харитона. Особенности

механизма энерговыделения в гомогенных и гетерогенных конденсированных веществах. Методы измерения основных параметров детонации. Современные методы решения задач физики горения и взрыва.

6. Основная литература

1. Маррел Дж., Кетти С., Телдер Дж. Теория валентности. М.: Мир, 1968.
2. Герцберг Г. Спектры и строение простых свободных радикалов. М-Л., Физматгиз, 1962.
3. Баум Ф.А., Орленко Л.П., Стапокович К.П., Челышев В.П., Шехтер Б.И. Физика взрыва. М.: Наука, 1975.
4. Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики. М.: Высшая 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. Бучаченко А.Л., Сагдеев Р.З., Салихов К.М. Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях. Новосибирск, Наука, 1978.
8. Манелис Г.Б., Назин Г.М., Рубцов Ю.И., Струнин В.А. Термическое разложение и горение взрывчатых веществ и порохов. М.: Наука, 1996.
9. Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б., Махвиладзе Г.М. Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука, 1980.
10. Беляев А.Ф., Боболев В.К. и др. Переход горения конденсированных систем и взрыв. М., Наука, 1973.
11. Бахман Н.Н., Беляев А.Ф. Горение гетерогенных конденсированных систем. М.: Наука, 1967.
12. Новожилов Б.П. Нестационарное горение твердых ракетных топлив. М.: Наука, 1973.
13. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.

Дополнительная литература

1. Керригтон Н., Мак-Лечлан Э. Магнитный резонанс и его применение в химии. М.: Мир, 1970.
2. Башкин А.С., Игошин В.И., Орасвский А.П., Щеглов В.А. Химические лазеры. М.: Наука, 1982.
3. Замираев К.И., Молин Ю.Н., Салихов К.М. Спиновый обмен. Теория и физико-химические приложения. Новосибирск, 1977.
4. Вилопов В.Н. Теория зажигания конденсированных веществ. М.: Наука, 1984.
5. Льюис Б., Эльбе Г. Горение, пламя и взрывы в газах. М.: Мир, 1968.
6. Похил П.Ф., Мальцев В.М., Зайцев В.М. Методы исследования процессов горения и детонации. М.: Наука, 1969.
7. Кондратьев В.Н., Пикигин Е.В. Кинетика и механизм газофазных реакций. М.: Наука, 1974.
8. Курайт Р., Фридрикс П. Сверхзвуковые течения и ударные волны. М.: ИЛ, 1950.
9. Семенов П.Н. О некоторых проблемах химической кинетики и реакционной способности. М.: АН СССР, 1958.
10. Зельдович Я.Б., Компанец А.С. Теория детонации. М.: ГГТИ, 1955.
11. Щелкин К.И., Трошин Я.К. Газодинамика горения. М.: АН СССР, 1963.