

ПРОГРАММА

кандидатского экзамена по специальности

1.3.17 Химическая физика, горение и взрыв,

физика экстремальных состояний веществ

физико-математические науки, технические науки

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

I. Строение 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 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.

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.

Молекулярная динамика, межмолекулярные потенциалы и молекулярная организация веществ. Компьютерная молекулярная динамика как метод диагностики структуры и динамики веществ.

Строение и свойства твердого тела. Теплостойкость 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.

II. 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 3-х 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.

III. 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.

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.

IV. Химическая физика горения и взрыва

Теория процессов горения. Виды горения. Теория и критерий теплового взрыва. Цепной взрыв. Пределы цепного взрыва. Воспламенение, самовоспламенение и зажигание. Минимальная энергия зажигания.

Теория и закономерности стационарного горения газовой смеси. Нормальная скорость распространения пламени. Пределы распространения пламени, предельный диаметр и предельная концентрация компонентов смеси. Диффузионно-тепловая устойчивость ламинарных пламен. Представление о турбулентном горении. Условия сохранения на фронте пламени. Адиабата Гюгонио.

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.

Самораспространяющийся высокотемпературный синтез.

Горение жидких, твердых и газообразных взрывчатых веществ. Горение пористых зарядов взрывчатых веществ и порохов. Фильтрационное горение. Условия перехода послойного горения на конвективный режим и во взрыв. Отличие от горения топлива в

окислительной атмосфере.

Ударные волны. 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. Ударные волны в пористых средах. Ударные волны в веществе с полиморфными превращениями. Ударная волна разгрузки. Взаимодействие волн — распады разрывов, затухание ударных волн. Структура ударной волны в среде.

Детонация. Модель Зельдовича — Неймана — Дёринга. Правило отбора скорости стационарной детонации. Структура детонационной волны. Устойчивость детонационных волн. Пределы детонации. Пределы возбуждения детонации. Принцип Харитона. Особенности механизма энерговыделения в гомогенных и гетерогенных конденсированных веществах. Методы измерения основных параметров детонации: скорость детонации, массовая скорость, давление, бризантность, теплота взрыва, чувствительность, термостойкость, метательная способность, температура взрыва. Особенности детонации в газе, жидкой и твердой средах. Пузырьковая детонация.

Взрывчатые вещества. Основные принципы, свойства и виды. Характеристики взрывчатых веществ. Чувствительность ВВ к внешним воздействиям, виды воздействий. Ударно — волновая чувствительность (УВЧ), анизотропия УВЧ. Критический и предельный диаметр, взаимосвязь со структурой и плотностью, теория критического диаметра Кобылкина. Кислородный баланс. Энергетические характеристики взрыва, закон Гесса. Уравнения состояния продуктов детонации конденсированных взрывчатых веществ: УРС с полным термодинамическим описанием и без рассмотрения состава ПД. Теория горячих точек. Современные теории развития химической реакции при внешнем воздействии на ВВ.

Понятие кумуляции, механизм формирования струи, возможные режимы кумуляции. Действие взрыва на окружающую среду. Взрыв в твердых телах. Взрыв в воздухе и в жидкости. Обработка материалов взрывом. Упрочнение металлов взрывом. Сварка взрывом. Взрывное прессование пористых материалов. Штамповка металлов взрывом. Ударно — волновой и детонационный синтез сверхтвердых материалов.

Электромагнитные явления при взрыве газа и конденсированного ВВ.

Рекомендуемая основная литература

1. Дж. Маррсл, С. Кетти, Дж. Теддер. Теория валентности. М.: Мир, 1968.
2. Г. Герцберг. Спектры и строение простых свободных радикалов. М-Л., Физматем, 1962.
3. Андреев С.Г., Бабкин А.В., Баум Ф.А. и др., Имховик Н.А., Кобылкин И.Ф., Колпаков В.И., Ладов С.В., Одинцов В.А., Орленко Л.П., Охитин В.Н., Селиванов В.В., Соловьев В.С., Станюкович К.П., Челышев В.П., Шехтер Б.И. Физика взрыва, Т.~1. М: Физматлит, изд. 3-е, испр., 2002, 2004. 832 с.
4. Андреев С.Г., Бабкин А.В., Баум Ф.А. и др., Имховик Н.А., Кобылкин И.Ф., Колпаков В.И., Ладов С.В., Одинцов В.А., Орленко Л.П., Охитин В.Н., Селиванов В.В., Соловьев В.С., Станюкович К.П., Челышев В.П., Шехтер Б.И. Физика взрыва, Т.~2. М: Физматлит, изд. 3-е, испр., 2002, 2004. 656 с.

5. Д. А. Франк-Каменецкий. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М., Наука, 1987.
6. Е.Т. Денисов, О.М. Саркисов, Г.И. Лихтенштейн. Химическая кинетика. М.: Химия, 2000
7. А. Л. Бучаченко, Р. З. Сагдеев, К. М. Салихов. Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях. Новосибирск, Наука, 1978.
8. Г. Б. Манелис, Г. М. Назин, Ю. И. Рубцов, В. А. Струнин. Термическое разложение и горение взрывчатых веществ и порохов. М.: Наука, 1996.
9. Я. Б. Зельдович, Г. И. Баренблатт, В. Б. Либрович, Г. М. Махвиладзе. Математическая теория горения и взрыва. М., Наука, 1980.
10. А. Ф. Беляев, В. К. Боболев и др. Переход горения конденсированных систем во взрыв. М., Наука, 1973.
11. Н. Н. Бахман, А. Ф. Беляев. Горение гетерогенных конденсированных систем. М., Наука, 1967.
12. Б. Н. Новожилов. Нестационарное горение твердых ракетных топлив. М., Наука, 1973.
13. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. Физматлит, 2008 г. 656 с.
14. Г.И.Канель, С.В.Разоренов, А.В.Уткин, В.Е.Фортон. Ударно-волновые явления в конденсированных средах. М., Янус-К, 1996.
15. Б. Л. Глушак, Физика взрыва, сборник задач и упражнений с решениями. 2009. 2-е изд-е. Саров: ФГУП «РФЯЦ--ВНИИЭФ». 264 с.
16. Экспериментальные методы в физике ударных волн и детонации. Монография. Под ред. М.В.Жерноклетова. 2020. Саров:«РФЯЦ--ВНИИЭФ». 519 с.
17. Экспериментально – теоретические исследования быстропротекающих процессов. И.А. Балаганский, Л.А. Мерзиевский, А.В. Гуськов, К.Е. Милевский, В.В. Андреев, Ю.О. Поляков, А.В. Виноградов. Новосибирск, изд-во НГТУ, 2016. 262 с.
18. Б.Г. Лобойко, О.Ю. Диков, Е.Б. Смирнов. Сборник задач по газодинамике взрыва. 2007. Снежинск: изд-во РФЯЦ—ВНИИТФ. 227 с.
19. В.С. Кирчанов. Физические основы нанотехнологий фотоники и оптоинформатики. Пермь. Изд-во Перм. нац. иссл. политех. ун-та 2019. 221с.
20. Л. П. Орленко, Физика взрыва и удара, Учебное пособие для вузов. 2-е изд., испр. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. 304 с.
22. Н. М. Эмануэль, Д. Г. Кнорре. Курс химической кинетики. М, Высшая школа, 1974.

Разработчик программы:

Ведущий научный сотрудник Лаборатории физики взрыва д.ф.-м.н. Н.П. Сатонкина.

Согласовано:

Заместитель директора по научной работе д.ф.-м.н. Прууэл Эдуард Рейнович

Главный научный сотрудник д.ф.-м.н. Васильев Анатолий Александрович

Старший научный сотрудник к.ф.-м.н. Кашкаров Алексей Олегович