

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Чувашский государственный университет имени И.Н. Ульянова»

УТВЕРЖДАЮ



Проректор по научной работе
ФГБОУ ВО «Чувашский государственный
университет имени И.Н. Ульянова»


Е.Н. Кадышев

15 апреля 2022 г.

ПРОГРАММА КАНДИДАТСКОГО ЭКЗАМЕНА

по научной специальности
**1.3.17. Химическая физика, горение и взрыв,
физика экстремальных состояний вещества**

Программу составил(и):

Доктор физико-математических наук, профессор

В.С. Аbruков

Программа рассмотрена и одобрена:
на заседании кафедры 29 марта 2022 г., протокол № 9
заведующий кафедрой В.С. Аbruков

Согласовано:

Начальник отдела подготовки и
повышения квалификации
научно-педагогических кадров С.Б. Харитоновна

1. Содержание кандидатского экзамена.

№ п/п	Наименование раздела	Содержание
Раздел 1. Строение вещества		
1.	Тема 1. Основы квантовой теории многоэлектронных систем.	Основы квантовой теории многоэлектронных систем. Термины, определения, основные уравнения
2.	Тема 2. Строение и свойства твердого тела.	Строение и свойства твердого тела. Природа сил взаимодействия в кристаллах.
Раздел 2. Основы молекулярной фотоники		
3.	Тема 3. Электронная структура молекул.	Электронная структура молекул. Возбужденные состояния. Поглощение и испускание света. Спектры поглощения и люминесценции. Флуоресценция и фосфоресценция.
4.	Тема 4. Методы оптической (в том числе нелинейной) спектроскопии	Методы оптической (в том числе нелинейной) спектроскопии: адсорбционные, флуоресцентные, поляризационные, методы комбинационного рассеяния.
Раздел 3. Динамика атомов и молекул		
5.	Тема 5. Химическая термодинамика и равновесие.	Химическая термодинамика и равновесие. Равновесное распределение молекул идеального газа. Распределение Максвелла и распределение Больцмана.
6.	Тема 6. Мономолекулярные реакции.	Мономолекулярные реакции. Механизм активации молекул. Сильные столкновения и ступенчатое возбуждение.
7.	Тема 7. Термический распад двухатомных молекул.	Термический распад двухатомных молекул. Бимолекулярные реакции, идущие через образование промежуточного комплекса.
8.	Тема 8. Обмен энергии при молекулярных столкновениях.	Обмен энергии при молекулярных столкновениях. Превращение поступательной, вращательной и колебательной энергий при столкновениях. Релаксация по поступательным, вращательным и колебательным степеням свободы.
Раздел 4. Основы химической кинетики		
9.	Тема 9. Механизм и скорость химической реакции.	Механизм и скорость химической реакции. Закон действующих масс. Порядок реакции. Константа скорости. Закон Аррениуса. Прямая и обратная кинетическая задача.
10.	Тема 10. Индуцированные и гомогенно-каталитические реакции.	Индуцированные и гомогенно-каталитические реакции. Фотохимические и радиационно-химические реакции. Механизм гомогенного катализа. Кинетика гомогенно-каталитических реакций.
11.	Тема 11. Гетерогенный катализ.	Гетерогенный катализ. Равновесие и кинетика адсорбции на однородных и неоднородных поверхностях. Механизмы гетерогенного катализа.
Раздел 5. Горение и взрыв. Физика экстремальных состояний вещества.		
12.	Тема 12. Теория процессов горения.	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 накаливаемой стенкой. Зажигание искрой.
13.	Тема 13. Теория и	Теория и закономерности стационарного горения

	закономерности стационарного горения газовой смеси.	газовой смеси. Нормальная скорость распространения пламени. Пределы распространения пламени, предельный диаметр и предельная концентрация компонентов смеси. Представление о турбулентном горении.
14.	Тема 14. Горение твердых и жидких веществ в окислительной атмосфере	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.
15.	Тема 15. Горение жидких взрывчатых веществ	Горение жидких взрывчатых веществ. Горение пористых зарядов взрывчатых веществ и порохов.
16.	Тема 16. Ударные волны.	Ударные волны. Понятие простой волны. Ударные волны. Уравнения сохранения массы, импульса и энергии на фронте ударной волны.
17.	Тема 17. Современная теория детонации.	Современная теория детонации. Структура детонационной волны. Устойчивость детонационных волн. Пределы детонации.
Раздел 6. Физика наноструктур		
18.	Тема 18. Структура поверхности и ее физические свойства.	Структура поверхности и ее физические свойства. Атомарно-чистые поверхности. Изменение электронной структуры, работы выхода, поверхностной проводимости и т.п. при реконструкции. Симметрия поверхности. Границы раздела полупроводник–полупроводник, полупроводник–металл и полупроводник–диэлектрик
19.	Тема 19. Наноструктуры.	Наноструктуры. Тонкие пленки. Компьютерное моделирование наноструктур и наносистем. Фотонные кристаллы. Углерод. Аллотропия углерода. Кластеры.
20.	Тема 20. Общее устройство и принципы работы СЗМ.	Общее устройство и принципы работы СЗМ. Физические основы сканирующей туннельной микроскопии. Туннельный эффект в квази-классическом приближении. Физические основы сканирующей атомно-силовой микроскопии.

2. Перечень вопросов к кандидатскому экзамену.

1. Основы квантовой теории многоэлектронных систем.
2. Строение и свойства твердого тела. Природа сил взаимодействия в кристаллах.
3. Электронная структура молекул. Возбужденные состояния. Поглощение и испускание света. Спектры поглощения и люминесценции. Флуоресценция и фосфоресценция.
4. Методы оптической (в том числе нелинейной) спектроскопии: адсорбционные, флуоресцентные, поляризационные, комбинационного рассеяния.
5. Химическая термодинамика и равновесие. Равновесное распределение молекул идеального газа. Распределение Максвелла и распределение Больцмана.
6. Мономолекулярные реакции. Механизм активации молекул. Сильные столкновения и ступенчатое возбуждение.
7. Термический распад двухатомных молекул. Бимолекулярные реакции, идущие через образование промежуточного комплекса.
8. Обмен энергии при молекулярных столкновениях. Превращение поступательной, вращательной и колебательной энергий при столкновениях. Релаксация по поступательным, вращательным и колебательным степеням свободы.
9. Механизм и скорость химической реакции. Закон действующих масс. Порядок реакции. Константа скорости. Закон Аррениуса. Прямая и обратная кинетическая задача.
10. Индуцированные и гомогенно-каталитические реакции. Фотохимические и радиационно-

- химические реакции. Механизм гомогенного катализа. Кинетика гомогенно-каталитических реакций.
11. Гетерогенный катализ. Равновесие и кинетика адсорбции на однородных и неоднородных поверхностях. Механизмы гетерогенного катализа.
 12. Уравнения теплопроводности и диффузии в химически реагирующей среде. Теория и критерий теплового взрыва. Цепной взрыв. Пределы цепного взрыва. Воспламенение и зажигание. Зажигание накаливаемой стенкой. Зажигание искрой.
 13. 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.
 14. 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.
 15. Горение жидких взрывчатых веществ. Горение пористых зарядов взрывчатых веществ и порохов.
 16. Ударные волны. Понятие простой волны. Ударные волны. Уравнения сохранения массы, импульса и энергии на фронте ударной волны.
 17. Современная теория детонации. Правило отбора скорости стационарной детонации. Структура детонационной волны. Пределы детонации.
 18. Связь химической и физической природы веществ и систем с их термодинамическими параметрами, характеристиками термического разложения, горения, взрывчатого превращения.
 19. Структура, параметры и устойчивость волн горения, детонации, взрывных и ударных волн.
 20. Односторонние и обратимые реакции первого и второго порядка. Кинетика реакций первого порядка в открытой системе.
 21. Горячие диффузионные пламена в предварительно не перемешанных газах - окислителя и горючего. Теплопроводность и диффузия в волне горения. Тепловая теория распространения пламени
 22. Горячие пламена в предварительно перемешанных газах. Основные экспериментальные данные. Нормальная скорость распространения ламинарного пламени. Теплопроводность и диффузия в волне горения. Тепловая теория распространения пламени.
 23. Процессы горения и взрывчатого превращения в устройствах и аппаратах для производства энергии, работы, получения веществ и продуктов.
 24. Тепловая теория распространения пламени. Подобие полей концентрации и температуры в волне горения. Пределы распространения пламени. Основные задачи исследования процессов горения.
 25. Самовоспламенение. Цепной взрыв. Зажигание газовой смеси нагретой поверхностью
 26. Классификация методов диагностики горения. Контактные и бесконтактные методы диагностики. Характеристика оптических методов: методы видеорегистрации излучения или поглощения в различных областях спектра. Методы измерения скорости горения.
 27. Атомарно-чистые поверхности. Способы получения атомарно-чистых поверхностей. Реальная поверхность. Виды неоднородностей (физические, химические, индуцированные).
 28. Структура поверхности и ее физические свойства. Изменение электронной структуры, работы выхода, поверхностной проводимости и т.п. при реконструкции. Симметрия поверхности. Двумерные решетки Браве. Дефекты поверхности. Влияние дефектов на структуру поверхности.
 29. Границы раздела полупроводник-полупроводник, полупроводник-металл и полупроводник-диэлектрик. Поверхностные и приповерхностные электронные состояния. Приповерхностная область пространственного заряда полупроводника. Зонная диаграмма.
 30. Механизмы роста пленок. Поверхностные процессы, происходящие при выращивании тонкой пленки (поверхностная диффузия, взаимодиффузия, встраивание в решетку, поверхностная агрегация).
 31. Тонкие пленки. Физические и химические методы получения тонких пленок.
 32. Адсорбция и адгезия. Адгезия тонких пленок к поверхности. Кинетика адсорбции. Теория Ленгмюра. Физическая и химическая адсорбция. Электронное состояние адатома. Энергия связи адатомов с поверхностью.
 33. Методы определения структуры поверхности (дифракция медленных электронов, дифракция отраженных быстрых электронов).
 34. Методы определения состава поверхности и химического состояния атомов на поверхности. Электронная спектроскопия, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия.
 35. Компьютерное моделирование наноструктур и наносистем. Молекулярное конструирование. Компьютерная визуализация нанобъектов. Возможности численного

эксперимента. Примеры молекулярного моделирования наноструктур, молекулярных переключателей.

36. Квантовая механика наносистем. Квантоворазмерные эффекты в нанобъектах.

37. Квазичастицы в твердом теле и в наноструктурированных материалах. Квантовые точки. Нитевидные кристаллы, волокна, нанотрубки, тонкие пленки и гетероструктуры.

38. Фотонные кристаллы. Классификация фотонных кристаллов. Теория фотонных запрещенных зон. Изготовление фотонных кристаллов.

39. Углерод. Аллотропия углерода. Алмазоподобные пленки. Графены. Фуллерены. Нанотрубки.

40. Наноструктуры. Классификация наноструктур. Кластеры. Кластерные модели. Магические числа. Металлические нанокластеры. Свойства металлических нанокластеров.

41. Полупроводниковые нанокластеры. Получение, свойства и применение.

42. Наноструктурные жидкости. Коллоиды, золи, гели, взвеси, полимерные композиты. Мицеллы.

43. Магнитные наноструктуры. Методы синтеза магнитных частиц. Перспективные применения. Феррофлюиды (магнитные жидкости).

44. Сверхпроводящие материалы. Получение. Оболочный эффект. Применение сверхпроводниковых наноструктур.

45. Химические методы получения наноструктур. Пленки Ленгмюра-Блоджетта. Золь-гель метод. Жидкофазная эпитаксия.

46. Особенности электронного спектра металлов, полупроводников и диэлектриков. Поглощение и отражение света в металлах. Плазмоны. Поглощение света на колебаниях решетки. Фононы.

47. Прямозонные и непрямозонные полупроводники. Прямые (вертикальные) и непрямые оптические переходы. Поглощение света при прямых переходах, комбинированная плотность состояний. Поглощение света при непрямых переходах, виртуальные состояния. Температурная зависимость коэффициента поглощения.

48. Общее устройство и принципы работы СЗМ. Зондовые датчики, сканирующие элементы, типы взаимодействия, роль обратной связи.

49. Физические основы сканирующей туннельной микроскопии. Туннельный эффект в квази-классическом приближении. Туннельный ток в системах металл-диэлектрик-металл и металл-диэлектрик-полупроводник. Ограничения сканирующей туннельной микроскопии.

50. Физические основы сканирующей атомно-силовой микроскопии. Потенциал взаимодействия зонда с образцом в АСМ. Зависимость силы взаимодействия от расстояния между зондом и образцом – контактный, полуконтактный и бесконтактный режимы АСМ.

51. Методы интеллектуального анализа и моделирования данных.

52. Искусственные нейронные сети как метод моделирования физических и химических процессов.

53. Концепция «Геном высокоэнергетических материалов»

54. Концепция «Геном наноматериалов».

55. Наука о данных (Data Science).

56. Горение порохов и твердых ракетных топлив. Основные закономерности. Разработка новых перспективных составов высокоэнергетических материалов.

57. Детонация высокоэнергетических материалов. Основные закономерности. Разработка новых перспективных составов высокоэнергетических материалов.

3. Рекомендуемая литература

Рекомендуемая основная литература

№	Название
1.	Химическая связь. Метод валентных связей : методические указания / составители С. В. Борисевич [и др.], под редакцией А. М. Кузнецов, Л. Г. Шевчук. — Казань : Казанский национальный исследовательский технологический университет, 2016. — 24 с. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/63540.html
2.	Чичинин, А. И. Атомная и молекулярная спектроскопия : учебник / А. И. Чичинин. —

	Новосибирск : Новосибирский государственный университет, 2019. — 884 с. — ISBN 978-5-4437-0927-7. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/93805.html
3.	Брянский, Б. Я. Основы термодинамики и кинетики химических реакций : учебное пособие / Б. Я. Брянский. — Саратов : Вузовское образование, 2017. — 111 с. — ISBN 978-5-4487-0045-3. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/66637.html - DOI: https://doi.org/10.23682/66637
4.	Головнев, Н. Н. Энергетика и направленность химических процессов. Химическая кинетика и химическое равновесие : учебное пособие / Н. Н. Головнев. — Красноярск : Сибирский федеральный университет, 2018. — 148 с. — ISBN 978-5-7638-3783-4. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/84189.html
5.	Косточко, А. В. Пороха, ракетные твердые топлива и их свойства. Физико-химические свойства порохов и ракетных твердых топлив : учебное пособие / А. В. Косточко, Б. М. Казбан. — Казань : Казанский национальный исследовательский технологический университет, 2011. — 367 с. — ISBN 978-5-7882-1003-2. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/62239.html
6.	Германова, Т. В. Теория горения и взрыва : учебное пособие / Т. В. Германова. — Тюмень : Тюменский индустриальный университет, 2020. — 81 с. — ISBN 978-5-9961-2021-5. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/115064.html
7.	Эквист, Б. В. Теория горения и взрыва : учебник / Б. В. Эквист. — Москва : Издательский Дом МИСиС, 2018. — 180 с. — ISBN 978-5-906953-90-2. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/84423.html
8.	Райзер, Ю. П. Введение в гидрогазодинамику и теорию ударных волн для физиков : учебное пособие / Ю. П. Райзер. — Долгопрудный : Издательский Дом «Интеллект», 2011. — 431 с. — ISBN 978-5-91559-084-6. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/103350.html
9.	Эквист, Б. В. Теория детонации взрывчатых веществ : учебное пособие / Б. В. Эквист. — Москва : Издательский Дом МИСиС, 2016. — 24 с. — ISBN 978-5-906846-18-1. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/64204.html
10.	Основы нанотехнологии : учебник / Н. Т. Кузнецов, В. М. Новоторцев, В. А. Жабрев, В. И. Марголин. — 3-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2021. — 398 с. — ISBN 978-5-906828-26-2. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/109426.html
11.	Нанотехнологии. Химические, физические, биологические и экологические аспекты : монография / М. Н. Тимофеева, В. Н. Панченко, В. В. Ларичкин [и др.]. — Новосибирск : Новосибирский государственный технический университет, 2019. — 283 с. — ISBN 978-5-7782-3863-3. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/98798.html
12.	Карпухин, С. Д. Атомно-силовая микроскопия : учебное пособие / С. Д. Карпухин, Ю. А. Быков. — Москва : Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана, 2012. — 40 с. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/31375.html

Рекомендуемая дополнительная литература

№	Название
1.	Комплексные соединения. Теория валентных связей : тесты / составители М. М. Петрова, Е. М. Зуева, А. М. Кузнецов. — Казань : Казанский национальный исследовательский технологический университет, 2016. — 52 с. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/61863.html
2.	Илюшов, Н. Я. Физико-химические основы горения : учебно-методическое пособие / Н. Я. Илюшов, Л. П. Власова. — Новосибирск : Сибирский государственный университет

	телекоммуникаций и информатики, 2017. — 58 с. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/78150.html
3.	Гусев А. И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии: Физматлит / Гусев А. И. - М.: Физматлит, 2005. – 410 с.
4.	Кочаков В. Д. Основы атомно-силовой наноскопии: учебное пособие. Чебоксары: Изд-во Чуваш. ун-та, 2010. - 55с.
5.	Валиев Р. З. Объемные наноструктурные металлические материалы: получение, структура и свойства. М.: Академкнига, 2007. - 397с.
6.	Климов В. В. Наноплазмоника: [монография] / Климов В. В. - М.: Физматлит, 2009. - 480с.
7.	Сергеев Г. Б. Нанохимия: учебное пособие / Сергеев Г. Б. - М.: Кн. дом "Университет", 2007.
8.	Дьячков П. Н. Углеродные нанотрубки: строение, свойства, применения / Дьячков П. Н. - М.: Бином. Лаб. знаний, 2006. - 293с.: ил. - (Нанотехнология).
9.	Суздалев И. П. Нанотехнология. Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. М.: КомКнига, 2006. - 589с.
10.	Талин, Д. Д. Физико-химические свойства взрывчатых веществ, порохов и твердых ракетных топлив : учебное пособие / Д. Д. Талин. — Пермь : ПНИПУ, 2007. — 274 с. — ISBN 978-5-88151-809-7. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/160919
11.	Наумова, О. А. Утилизация энергонасыщенных материалов и изделий. Применение порохов и твердых ракетных топлив в гражданских целях : учебное пособие / О. А. Наумова. — Красноярск : СибГУ им. академика М. Ф. Решетнёва, 2021. — 94 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/195170

Перечень рекомендуемых ресурсов сети «Интернет»

№	Название
1.	Научная библиотека ЧувГУ [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://library.chuvsu.ru
2.	Электронно-библиотечная система IPRBooks [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://www.iprbookshop.ru
3.	Образовательная платформа «Юрайт»: для вузов и ссузов [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://www.urait.ru
4.	Электронная библиотечная система «Издательство «Лань» [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://e.lanbook.com/
5.	Единое окно к образовательным ресурсам [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://window.edu.ru
6.	Российская государственная библиотека [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://www.rsl.ru
7.	Российская национальная библиотека [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://www.nlr.ru
8.	Научная электронная библиотека «Киберленинка» [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://www.rsl.ru
9.	Научная электронная библиотека «Elibrary» [Электронный ресурс]. – Режим доступа: www.elibrary.ru
10.	Библиографическая и реферативная база данных «Scopus» [Электронный ресурс]. – Режим доступа: www.scopus.com
11.	Поисковая платформа «Web of Science» [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://webofknowledge.com/
12.	Труды Абрикова В.С. [Электронный ресурс]. – Режим доступа https://www.researchgate.net/profile/V-Abrukov/research
13.	Создание базы знаний наноматериалов и нанотехнологий Чувашской Республики, 2013 – по настоящее время. Монография, презентации, статьи, автономные компьютерные модули базы знаний. [Электронный ресурс]. – Режим доступа http://amf21.ru/biblioteka/meroprijatija-provodimye-associaciei/proekt-rffi-sozdanie-bazy-znani-nanom/ .