

**ПРОГРАММА ВСТУПИТЕЛЬНОГО ЭКЗАМЕНА  
ПО КОНКУРСНОЙ ГРУППЕ «ФФФ КОФ ФИЗИКА И АСТРОНОМИЯ»  
ДЛЯ ПОСТУПАЮЩИХ В АСПИРАНТУРУ**

**Вопросы по выпускной квалификационной работе (магистратура или специалитет)**

1. Основные положения.
2. Новизна.
3. Актуальность.

**Электронная структура вещества**

1. Основы квантовой теории многоэлектронных систем. Адиабатическое приближение Борна-Оппенгеймера. Свойства симметрии многоэлектронной волновой функции. Многоэлектронные атомы. Периодическая система элементов Менделеева. Основы теории валентности.
2. Электронное строение молекул. Метод молекулярных орбиталей (на примере двухатомных молекул). Молекулярный ион и молекула водорода. Метод самосогласованного поля. Гибридизация атомных волновых функций. Метод молекулярных орбиталей в приближении Хюккеля. Сопряженные связи.
3. Строение твердого тела. Оптические и акустические фононы. Теплоемкость и теплопроводность кристаллов. Зонная теория. Электропроводность металлов, полупроводников и диэлектриков. Аморфные твердые тела. Жидкости.

**Элементарные процессы и химическая кинетика.**

1. Равновесие и энтропия. Термодинамические потенциалы. Распределение Максвелла и распределение Больцмана. Распределение Бозе и Ферми. Статистика Гиббса. Температура. Флуктуации. Химический потенциал. Равновесие фаз. Химические равновесия.
2. Элементарные атомно-молекулярные процессы. Полное и дифференциальное сечения рассеяния при столкновениях. Неупругие столкновения. Сечения и константы скорости процессов. Неадиабатические процессы.
3. Мономолекулярные реакции. Энергия активации и механизм активации молекул. Статистическая модель мономолекулярных реакций. Бимолекулярные реакции. Метод переходного состояния.
4. Обмен поступательной, вращательной и колебательной энергией при молекулярных столкновениях. Релаксация по поступательным, вращательным и колебательным степеням свободы. Кинетика заселенности уровней энергии. Возбуждение нейтральных частиц электронным ударом.
5. Скорость химической реакции. Закон действующих масс. Порядок реакции. Механизм химической реакции. Константа скорости. Закон Аррениуса.
6. Кинетика сложных реакций. Обратимые, последовательные, параллельные процессы. Лимитирующая стадия сложного процесса. Метод квазистационарных концентраций.
7. Цепные реакции. Процессы зарождения, продолжения и обрыва цепи. Длина цепи. Линейный и квадратичный обрыв цепей, обрыв цепей на стенках. Разветвленные цепные реакции. Полуостров воспламенения. Реакции с вырожденным разветвлением цепей.
8. Каталитические реакции. Автокатализ. Пространственно-временные диссипативные структуры в химии (на примере реакции Белоусова-Жаботинского).
9. Фотохимические реакции. Основные понятия радиационной химии.

### **Химическая физика горения и взрыва**

1. Теория процессов горения. Уравнения теплопроводности и диффузии в химически реагирующей среде. Теория теплового взрыва. Цепной взрыв. Пределы цепного взрыва. Воспламенение и зажигание.
2. Стационарное горение газовой смеси. Пределы распространения пламени. Диффузионно-тепловая неустойчивость пламени. Турбулентное горение. Холодные пламена.
3. Ударные волны и детонация. Балансные уравнения на фронте ударной волны. Ударная адиабата, изоэнтропы, их взаимное расположение. Ударные волны в реагирующих и релаксирующих средах.

### **Литература**

1. Степанов Н.Ф. /Квантовая механика и квантовая химия. М., МГУ. 2001. 519 с.
2. Фудзинага С. /Метод молекулярных орбит. М. «Мир» 1983, 461 с.
3. Коулсон Ч. /Валентность, М., Мир. 1965.
4. Грей Г. /Электронны и химическая связь, М., Мир. 1967 ..
5. Денисов Е. Т., Саркисов О. М., Лихтенштейн Г. И. /Химическая кинетика. М.: Химия, 2000. 568 с.
6. Эмануэль Н. М., Кнорре Д. Г. /Курс химической кинетики. М.: Высшая школа, 1974. 400 с.
7. Кондратьев В. Н., Никитин Е. Е. /Кинетика и механизм газофазных реакций. М.: Наука, 1974. 558 с.
8. Уманский С.Я. /Теория элементарного акта химического превращения в газе. М.: МГУ, 2000. 286 с.
9. Крылов О. В. /Гетерогенный катализ. М.: Академкнига, 2004. 679с.
10. Франк-Каменецкий Д.А. /Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М., Наука. 1987.
11. Манелис Г.Б., Назин Г.М., Рубцов Ю.И., Струнин В.А. /Термическое разложение и горение взрывчатых веществ и порохов. М.: Наука, 1996.
12. Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б., Махвиладзе Г.М./ Математическая теория горения и взрыва. М. Наука, 1980.