

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева»

УТВЕРЖДЕНА

Решением научно-технического совета
протокол № 1 от «24» января 2022 г.

Председатель НТС, первый проректор -
проректор по научно-исследовательской
работе  А.Б. Прокофьев

Ученый секретарь НТС
 Л.В. Родионов

**ПРОГРАММА
КАНДИДАТСКОГО ЭКЗАМЕНА**

по научной специальности

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

1. Волновая функция частицы. Уравнение Шредингера. Квантовое состояние и энергетические уровни частицы.
2. Квантовые состояния электрона в атоме. Главное, азимутальное и магнитные квантовые числа. Спин электрона. Принцип Паули.
3. Структура атомов и их спектры. Электронные переходы. Правила отбора. Атом водорода. Многоэлектронные атомы. Синглетные и триплетные состояния. Спин-орбитальное взаимодействие.
4. Теория функционала плотности. Энергия нулевых колебаний. Поверхность потенциальной энергии. Переходные состояния. Промежуточные состояния.
5. Вариационный метод. Базисные наборы. Детерминант Слейтера.
6. Ограниченный метод Хартри-Фока. Процедура самосогласования.
7. Структура молекул. Приближение Борна-Оппенгеймера. Теория молекулярных орбиталей. Гомоядерные двухатомные молекулы. Гетероядерные двухатомные молекулы.
8. Молекулярные спектры. Вращательные и колебательные спектры молекул. Ангстремизм. Спектры двухатомных молекул. Рамановский спектр.
9. Спектры поглощения и люминесценции. Флуоресценция и фосфоресценция. Спектры комбинационного рассеяния.
10. Метод ЭПР и ЯМР.
11. Теория переходного состояния (метод активированного комплекса). Мономолекулярные реакции. Предел высокого давления. Теория RRKM (Райс-Рамспергер-Кассель-Маркус). Зависимость константы скорости от давления и температуры. Термическая диссоциация.
12. Последовательные и параллельные реакции. Цепные реакции.
13. Пиролиз углеводородных соединений. Измерение констант скоростей мономолекулярных реакций при высоких температурах и давлениях.
14. Приближения Франка-Кондона и Герцберга-Теллера.

15. Уровни энергии и колебательный спектр двухатомной молекулы. Потенциал Морзе. Ангармоничность колебаний.
16. Атомно-молекулярные столкновения. Типы столкновений. Сечение столкновений. Распределение по скоростям и энергиям. Распределение Максвелла и распределение Больцмана.
17. Метод молекулярных орбиталей и его применение к двухатомным молекулам.
18. Потенциальные поверхности электронно-возбужденных состояний. Переходы между состояниями.
19. Переходные состояния ППЭ. Путь химической реакции.
20. Химические реакции в экстремальных условиях. Горение углеводородов. Диффузионные пламена. Распространение пламени. Взрыв. Химические реакции в межзвездном пространстве.
21. Потенциал ионизации и сродство к электрону.
22. Экспериментальные методы в физике столкновений. Источники атомных и молекулярных пучков. Источники электронов и ионов. Скрещенные пучки. Детектирование атомов, молекул и ионов. Масспектрометрия.
23. Возбуждение атомов и молекул. Химическое возбуждение. Возбуждение электронным ударом. Фотовозбуждение. Источники света.
24. Энергообменные столкновительные процессы. Поступательно-поступательный энергообмен. Вращательно-поступательный энергообмен. Колебательно-колебательный энергообмен. Обмен электронной энергией.
25. Химические реакции в электрическом разряде. Возбуждение атомов и молекул электронным ударом. Низкотемпературная плазма.

Литература:

1. Загидуллин, М. В. Кинетика элементарных процессов в газах [Электронный ресурс] : [учеб. пособие]. - Самара.: Изд-во Самар. ун-та, 2017. - on-line
2. Байрамов, В.М. Основы химической кинетики и катализа : Учеб. пособие для вузов. - М.: Академия, 2003. - 256с
3. Эмануэль, Н. М. Курс химической кинетики : Учебн. пособ. для вузов. - М.: Высшая школа, 1974. - 400с.
4. Применение лазеров в спектроскопии и фотохимии [Текст] : пер. с англ.. - М.: Мир, 1983. – 272.
5. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия: Учебник для вузов. - М.: Мир, 2001. - 519с.