

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Ярославский государственный технический университет»



Утверждаю:
Председатель приемной комиссии,
ректор ФГБОУ ВО «ЯГТУ»

Е.О. Степанова

17.07.2025

**Программа вступительного испытания в аспирантуру
по научной специальности 1.3.17 «Химическая физика, горение и взрыв,
физика экстремальных состояний вещества»**

ЯГТУ самостоятельно проводит вступительное испытание при приеме на обучение по программам аспирантуры. Вступительное испытание проводится с каждым поступающим индивидуально. Экзаменационная комиссия в устной форме проводит собеседование по темам, представленным в приложении № 1 к настоящей программе. Цель собеседования – определить готовность поступающего к освоению выбранной программы аспирантуры.

Минимальное количество баллов, подтверждающее успешное прохождение вступительного испытания и необходимое для участия в конкурсе – 70.

Максимальное количество баллов за вступительное испытание – 100 баллов.

Критерии оценивания:

Оценка от 81 до 100 баллов	Соответствует высокому уровню подготовленности поступающего (поступающий исчерпывающе и точно ответил на все вопросы, продемонстрировал отличное владение базовыми знаниями в области выбранного направления).
Оценка от 61 до 80 баллов	Соответствует хорошему уровню подготовленности поступающего (поступающий точно и без повторных наводящих вопросов ответил на 60 – 80 % вопросов, продемонстрировал хорошее владение базовыми знаниями в области выбранного направления).
Оценка от 41 до 60 баллов	Соответствует удовлетворительному уровню подготовленности поступающего (поступающий точно и без повторных наводящих вопросов ответил на менее 60 % вопросов, продемонстрировал удовлетворительное владение базовыми знаниями в области выбранного направления).
Оценка от 21 до 40 баллов	Соответствует неудовлетворительному уровню подготовленности поступающего (поступающий не смог в полной мере продемонстрировать владение базовыми знаниями в области выбранного направления, при этом неудовлетворительно отвечал на заданные комиссией вопросы).
Оценка от 1 до 20 баллов	Выставляется за неподготовленность поступающего, проявившуюся в неспособности ответить на большую часть вопросов, заданных комиссией, и/или за грубые ошибки в базовых вопросах.
0 баллов	Оценка не выставляется в случае отсутствия ответа.

Перечень тем для подготовки к собеседованию**1. Строение вещества**

- 1.1. Операторы в квантовой механике. Линейный и эрмитов операторы, их свойства. Собственное значение и собственная функция оператора. Гамильтониан. Уравнение Шредингера для стационарных систем.
- 1.2. Основы квантовой теории многоэлектронных систем. Адиабатическое приближение Борна-Оппенгеймера. Операторы момента импульса. Уровни энергии. Основные принципы теории валентности.
- 1.3. Электронное строение молекул. Метод молекулярных орбиталей и его применение к двухатомным молекулам. Молекулярные орбитали гомоядерных двухатомных молекул. Гетероядерные двухатомные молекулы.
- 1.4. Гибридизация атомных волновых функций.
- 1.5. Электронное строение координационных соединений. Межмолекулярное взаимодействие.
- 1.6. Строение и свойства твердого тела. Колебания и волны в одномерной решетке. Колебания атомов трехмерной кристаллической решетки.
- 1.7. Нормальные колебания. Электрон в периодическом поле. Зоны Бриллюэна. Структура энергетических зон.
- 1.8. Приближенные методы решения уравнения Шредингера. Метод Хартри-Фока. Метод функционала плотности.

2. Химическая термодинамика и кинетика

- 2.1. Базовые понятия химической термодинамики. Изолированные, открытые и закрытые системы. Интенсивные и экстенсивные параметры состояния системы. Функции состояния. Теплота. Работа. Внутренняя энергия. Энтальпия. Уравнение состояния. Уравнение состояния идеального газа. Уравнение состояния газа Ван-дер-Ваальса.
- 2.2. Основные законы термодинамики. Термохимия. Формулировка первого начала термодинамики для различных термодинамических процессов. Теплоемкость. Теплоемкость идеального газа. Уравнение адиабаты. Тепловой эффект реакции. Закон Гесса. Следствия из закона Гесса. Энергия химических связей. Энтропия. Критерии самопроизвольности процессов в изолированной системе. Третье начало термодинамики. Постулат Планка. Методы расчета энтропии. Обратимые и необратимые процессы.
- 2.3. Термодинамические потенциалы. Химический потенциал. Термодинамические потенциалы – внутренняя энергия, энтальпия, потенциал Гельмгольца, потенциал Гиббса. Фундаментальные уравнения и термодинамические соотношения между термодинамическими величинами. Условия, определяющие направленность химической реакции. Химический потенциал.
- 2.4. Термодинамика химического и фазового равновесия. Условия химического равновесия. Закон действующих масс. Химическая переменная. Энергия Гиббса и энергия Гельмгольца реакции. Уравнения Вант-Гоффа (изотерма химической реакции). Зависимость константы равновесия от температуры. Гетерогенные химические равновесия. Основные определения теории фазового равновесия. Правило фаз Гиббса. Фазовые равновесия однокомпонентных систем. Уравнение Клапейрона-Клаузиуса. Критическое состояние вещества.
- 2.5. Предмет и основные понятия химической кинетики. Скорость химической реакции. Закон действующих масс. Константа скорости химической реакции.

- Порядок реакции. Температурная зависимость константы скорости. Закон Аррениуса. Предэкспонент и энергия активации константы скорости.
- 2.6. Формальная кинетика. Формальная кинетика простых реакций первого, второго и третьего порядков, обратимой реакции. Формальная кинетика сложных реакций. Последовательные и параллельные реакции. Приближение квазистационарных концентраций.
 - 2.7. Лимитирующая стадия сложного химического процесса. Тепловой взрыв. Реакции в открытых системах.
 - 2.8. Механизм элементарного акта химического превращения. Теория переходного состояния.
 - 2.9. Кинетика реакций в жидкости. Диффузионный и кинетический пределы константы скорости. Константа скорости диффузионно-контролируемой реакции нейтральных частиц. Частота столкновений и частота встреч реагентов в растворе. Эффект клетки.
 - 2.10. Цепные реакции. Неразветвленные цепные реакции. Кинетика установления квазистационарного режима протекания неразветвленной цепной реакции. Скорость цепной реакции. Разветвленные цепные реакции. Кинетика протекания разветвленной цепной реакции. Предельные явления. Реакция окисления водорода. Первый и второй пределы воспламенения. Полуостров воспламенения. Механизмы разветвления цепей.

3. Химическая физика горения и взрыва

- 3.1. Теория процессов горения. Уравнения теплопроводности и диффузии в химически реагирующей среде. Теория и критерий теплового взрыва. Цепной взрыв. Пределы цепного взрыва.
- 3.2. Горение твердых и жидких веществ в окислительной атмосфере. Горение летучих и нелетучих взрывчатых веществ, порохов, смесей горючего с окислителем. Физика нестационарного горения.
- 3.3. Горение жидких взрывчатых веществ. Горение пористых зарядов взрывчатых веществ и порохов. Фильтрационное горение.
- 3.4. Ударные волны и детонация. Понятие простой волны. Ударные волны. Уравнения сохранения массы, импульса и энергии на фронте ударной волны.
- 3.5. Теория детонации. Правило отбора скорости стационарной детонации. Структура детонационной волны. Устойчивость детонационных волн. Пределы детонации. Методы решения задач физики горения и взрыва.

Рекомендуемая литература

Основная литература

1. Минкин В.И., Симкин Б.Я. Минаев Р.М. Теория строения молекул. Ростов-на-Дону: Феникс, 1997. - 560 с.
2. Краснов К.С. Физическая химия. Учеб. для вузов/ К. С. Краснов, Н. К. Воробьев, И. Н. Годнее и др.; Под ред. К. С. Краснова. В 2- томах. – М.: Высш. шк., 2001. Т.1. - 512 с., Т.2. – 319 с.
3. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1987. - 502 с.
4. Льюис Б., Эльбе Г. Горение, пламя и взрывы в газах. М.: Мир, 1968. - 592 с.
5. Ударно-волновые явления в конденсированных средах / Т.Н. Канель, С.В. Разоренов, А.В. Уткин, В.Е. Фортов. М.: Янус-К, 1996. - 407 с.

Дополнительная литература

6. Денисов Е.Т., Саркисов О.М., Лихтенштейн Т.П. Химическая кинетика. М.: Химия, 2000. - 568 с.
7. Физика взрыва : в 2 т. / Андреев С. Г., Бабкин А. В., Баум Ф. А. [и др.] ; ред. Орленко Л. П. - 3-е изд., испр. - М. : Физматлит, 2004. - Т.1. - 823 с., Т.2. - 644 с.
8. Рекомендуемые для самостоятельного изучения издания и ресурсы информационно-телекоммуникационной сети Интернет:
 - ЭБС «Консультант студента» www.studentlibrary.ru;
 - Центр свободного программного обеспечения (СПО) <https://sites.google.com/site/linuxklass>;
 - Научно-техническая библиотека <http://www.sciteclibrary.ru/cgi-bin/public/YaBB.pl>.