

Приложение № 5
к программе
подготовки научных и научно-педагогических
кадров в аспирантуре НИЦ «Курчатовский институт»
по научной специальности
1.3.17. Химическая физика, горение и взрыв, физика
экстремальных состояний вещества

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
по специальной дисциплине
«Химическая физика, горение и взрыв, физика
экстремальных состояний вещества»

1. Цель и задачи освоения дисциплины

Целью дисциплины «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» является освоение теории химической связи, межмолекулярных взаимодействий и реакционной способности молекул. Задачами данного курса являются приобретение базовых знаний о строении и электронной структуре вещества, динамике атомов и молекул, освоение основ химической кинетики и молекулярной спектроскопии, теории фазовых переходов веществ, ознакомление с теориями процессов горения веществ в разных агрегатных состояниях, детонации, и поведения вещества в экстремальных условиях.

В рамках данного курса изучают квантовую теорию многоэлектронных систем, электронное строение молекул, метод молекулярных орбиталей; строение и свойства твердого тела, природу сил взаимодействия в кристаллах; химическую радиоспектроскопию, теорию процессов горения, уравнения теплопроводности и диффузии в химически реагирующей среде, теорию и критерий теплового взрыва, цепной взрыв и его пределы; теорию и закономерности стационарного горения газовой смеси, горение жидких взрывчатых веществ, горение пористых зарядов; ударные волны и детонацию, современную теорию детонации, правило отбора скорости стационарной детонации. Демонстрируются последние достижения и открытия в этой области.

2. Место дисциплины в структуре программы подготовки научных и научно-педагогических кадров

Дисциплина «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» входит в образовательный компонент и является специальной дисциплиной программы подготовки научных и научно-педагогических кадров для научной специальности 1.3.17. «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

В соответствии с учебным планом занятия проводятся на первом, втором году обучения (во втором, третьем, четвертых семестрах). Кандидатский экзамен сдается в четвертом семестре.

Объем дисциплины составляет 396 часов (11 зачетных единиц), из которых 198 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (лекции, занятия семинарского типа, групповые и индивидуальные консультации, мероприятия текущего контроля успеваемости и итогового контроля). Самостоятельная работа обучающегося составляет 198 часов. Текущий контроль успеваемости реализуется в рамках занятий семинарского типа, групповых и/или индивидуальных консультаций.

3. Требования к результатам освоения дисциплины

Данная дисциплина участвует в формировании следующих компетенций:

1) способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях;

2) способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития;

3) владение методологией теоретических и экспериментальных исследований в области профессиональной деятельности;

4) владение культурой научного исследования, в том числе с использованием современных информационно-коммуникационных технологий;

5) способность самостоятельно проводить научные исследования в области химической физики, горения и взрыва, физики экстремальных состояний вещества и применять полученные результаты для решения научно-исследовательских и научно-инновационных задач.

В результате освоения данной дисциплины аспирант должен знать:

- 1) основы строения вещества;
- 2) принципы расчетов скоростей химических реакций;
- 3) практические возможности методов исследования строения вещества и его превращений.

В результате освоения данной дисциплины аспирант должен уметь:

- 1) проводить необходимые эксперименты;
- 2) получать результаты, их обрабатывать и анализировать в рамках изучаемого метода;
- 3) использовать полученные результаты в практических целях для разработки новых материалов, явлений и процессов в них;

В результате освоения данной дисциплины аспирант должен владеть:

- 1) основными экспериментальными и теоретическими методами химической физики;
- 2) опытом научной деятельности;
- 3) навыками выполнения простейших квантово-механических расчетов и подготовки научных сообщений.

4. Объем дисциплины, виды учебной работы (в часах), структура и содержание дисциплины

4.1. Объем и виды учебной работы (в часах) по дисциплине в целом

Вид учебной работы	Всего часов
Общая трудоемкость базового модуля дисциплины	396
Аудиторные занятия (всего)	198
В том числе:	
Лекции (Л)	144
Семинары/практические занятия (С/ПрЗ)	54
Самостоятельная работа (СР)	198
В том числе*:	
Форма текущего контроля	реферат, контрольная работа, (домашние задания, индивидуальные и групповые консультации)
Форма итогового контроля	экзамен (КЭ)

(промежуточная аттестация)	
----------------------------	--

* приводятся все виды самостоятельной работы по данной дисциплине

4.2. Структура и содержание дисциплины

№ п/п	Наименование разделов, тем дисциплины	Часы			
		Всего	Л	С/ПрЗ	СР
1	Основы квантовой теории многоэлектронных систем	33	12	5	16
2	Электронное строение молекул	33	12	5	16
3	Электронное строение координационных соединений	33	12	5	16
4	Строение и свойства твердого тела	33	12	5	16
5	Химическая радиоспектроскопия	33	12	5	16
6	Элементарные атомно- молекулярные процессы	33	12	5	16
7	Мономолекулярные и бимолекулярные реакции	33	12	5	16
8	Механизм и скорость химической реакции	33	12	5	16
9	Химические реакции в жидкой фазе	33	12	5	16
10	Индукцированные и гомогенно-каталитические реакции	33	12	5	16
11	Гетерогенный катализ	33	12	2	19
12	Проблема порядка и беспорядка в структуре материи	33	12	2	19
Всего		396	144	54	198

5. Образовательные технологии

1. При реализации настоящей дисциплины предусмотрено применение следующих образовательных технологий: лекции-визуализации (все лекции сопровождаются презентациями), проблемные лекции с дискуссией

(на каждой лекции рассматриваются проблемные вопросы по актуальным направлениям развития предмета).

2. В учебном процессе помимо чтения лекций широко используются активные и интерактивные формы. Совместное и самостоятельное решение аспирантами задач по темам лекций на занятиях семинарского типа, самостоятельное изучение предложенных тем и выступление с докладами на занятиях.

В сочетании с внеаудиторной работой это способствует формированию и развитию профессиональных навыков обучающихся.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов

Текущий контроль (промежуточный) проводится на 7 и 14 неделе в форме контрольной работы с оценкой по пятибалльной системе. Критерии формирования оценки – уровень знаний пройденной части курса.

Примеры контрольных вопросов:

1. Показать, что амплитуда колебаний ядер в молекулярных системах составляет $\ell \sim ka$, где k – малый параметр Борна-Оппенгеймера, a – характерное межъядерное расстояние.

2. Вывести спиновые состояния двух электронов, отвечающие определённым значениям их суммарного спина.

3. Определить возможные термы молекул H_2 и O_2 , которые могут получиться при соединении атомов в основных электронных состояниях.

4. В приближении Хюккеля получить орбитальные энергии и отвечающие им волновые функции для π - электронов молекулы C_2H_4 .

5. Получить нормировочный множитель N – электронной волновой функции, представленной в виде детерминанта Слэтера.

6. Вывести, как зависит энергия взаимодействия двух атомов на далёких расстояниях R между ними.

7. Вывести правила отбора для разрешённых переходов в спектрах ЭПР по спиновым квантовым числам электрона и протона.

8. Изобразить картину сверхтонких уровней энергии неспаренного электрона для спектра ЭПР радикала $\dot{\text{C}}\text{H}_3$ с тремя эквивалентными протонами.

Для получения положительной оценки и для выполнения задания по самостоятельной работе аспиранту необходимо подготовить реферат по представленным или подобным темам объемом 15 – 20 страниц. Реферат должен быть написан самостоятельно и построен по типу статьи: краткая аннотация: 4 – 5 строк, введение (цели, задачи обзора, объект рассмотрения), основная часть (описание объекта или способа), заключение, литература. Обязательно предоставляется информация (ссылки на статьи и патенты) об авторах, институтах, лабораториях, которые разрабатывали представленную тематику. Перспективы и прогноз дальнейших исследований. Возможное применение данных разработок. Можно предоставить данные по фирмам и рекламную литературу по их деятельности, которые занимаются данными разработками. В реферате должны быть отражены методы формирования объекта, способы измерения его характеристик и свойств, применения.

Примеры тем предлагаемых рефератов:

1. Развитие учения о валентности.
2. Одноэлектронное и адиабатическое приближения в решении уравнения Шредингера.
3. Метод Хартри-Фока.
4. Теория функционала плотности в изучении строения и свойств многоэлектронных систем.
5. Правило фаз Гиббса.
6. Химический потенциал.
7. Обратимые реакции.

8. Энтропия и вероятность. Формула Больцмана.

Итоговый контроль – экзамен (КЭ).

Примеры вопросов к экзамену:

1. Чем приближение Борна-Оппенгеймера отличается от адиабатического приближения?
2. Написать волновую функцию первого возбуждённого состояния атома гелия.
3. Понятие зон Бриллюэна для фононов.
4. Получить выражение для константы скорости реакции в методе переходного состояния.
5. Сформулировать правило Поляни-Семёнова для химических реакций.
6. Чем фазовые переходы I-го рода отличаются от фазовых переходов II-го рода?

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

I. Основная литература:

1. Ковальчук, М.В. Идеология природоподобных технологий / Михаил Ковальчук; Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт». – Москва: Физматлит, 2021. – 336 с. – ISBN 978-5-9221-1931-3.
2. Семенов, Н.Н. Избранные труды: в 4 т. / Н.Н. Семенов. – М.: Наука. – 2004. – Том 3: О некоторых проблемах химической кинетики и реакционной способности / Н.Н. Семенов; ред. А. Е. Шилов. – М.: Наука, 2004. – 499 с. – ISBN 5-02-033707-2.
3. Физика взрыва: в 2 т. / С.Г. Андреев, А.В. Бабкин, Ф.А. Баум; под ред. Л.П. Орленко. – 3-е изд., испр. – М.: Физматлит. – 2004. – Т. 1. – 2004. – 823с. – ISBN 5-9221-0218-4.

5. Физика взрыва: в 2 т. / С.Г. Андреев, А.В. Бабкин, Ф.А. Баум под ред. Л.П. Орленко. – 3-е изд., испр. – М.: Физматлит. – 2004. – Т. 2. – 2004. – 656 с. – ISBN 5-9221-0220-6.

II. Дополнительная литература:

1. Чекмарев, А.М. Химия, ядерная энергетика и устойчивое развитие. / А.М. Чекмарев, Н.П. Тарасова, Ю. В. Сметанников; ред. П.Д. Саркисов. – М.: Академкнига ИКЦ, 2006. – 288 с. - ISBN 5-94628-215-8.

III. Перечень ресурсов Интернет, необходимых для освоения дисциплины:

1. Учебные материалы по основам химической физики МФТИ: [сайт]. – URL: <https://mipt.ru/dmcp/student/files/chmoph/> (дата обращения: 30.09.2022).

2. Фонд знаний «Ломоносов»: [сайт]. URL: <http://lomonosov-fund.ru/enc/ru/encyclopedia:01270:article> (дата обращения: 28.06.2022).

3. Словари и энциклопедии на Академике: [сайт]. – URL: <https://dal.academic.ru/dic.nsf/ruwiki/695372> (дата обращения: 28.06.2022).

IV. Доступ к электронным библиотекам:

1. Фонд знаний «Ломоносов»: [сайт]. URL: <http://lomonosov-fund.ru/enc/ru/encyclopedia:01270:article> (дата обращения: 28.06.2022).

2. Электронная библиотека Платонанет: [сайт]. – URL: https://platona.net/load/knigi_po_filosofii/2 (дата обращения: 28.06.2022).

3. Онлайн-каталог DOAJ: [сайт]. – URL: <https://doaj.org/> (дата обращения: 28.06.2022).

4. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU: [сайт]. – URL: <https://elibrary.ru/defaultx.asp> (дата обращения: 30.07.2022).

5. Сервер документов ЦЕРН: [сайт]. – URL: <https://cds.cern.ch/> (дата обращения: 30.07.2022).

6. Открытый доступ к журналам по физике и астрономии Physics related free-access Journals: [сайт]. – URL: <https://www.elsevier.com/physical-related-free-access-journals>

sciences-and-engineering/physics-and-astronomy/journals/open-access-in-physics-journals (дата обращения: 30.07.2022).

7. Большая научная библиотека: [сайт]. – URL: <http://www.scilib.net/> (дата обращения: 12.08.2022).

8. Научная электронная библиотека диссертаций и авторефератов: [сайт]. – URL: <https://www.dissercat.com/> (дата обращения: 12.08.2022).

9. Электронная библиотека механико-математического факультета Московского государственного университета: [сайт]. – URL: <http://lib.mexmat.ru/index.php> (дата обращения: 12.08.2022).

10. Электронная библиотека Российского фонда фундаментальных исследований: [сайт]. – URL: <https://www.rfbr.ru/rffi/ru/library> (дата обращения: 12.08.2022).

11. Вестник РФФИ: [сайт]. – URL: <https://www.rfbr.ru/rffi/ru/bulletin> (дата обращения: 30.08.2022).

12. Книги, изданные при поддержке РФФИ: [сайт]. – URL: <https://www.rfbr.ru/rffi/ru/books> (дата обращения: 30.08.2022).

V. Доступ к журналам и базам публикаций различных научных издательств:

1. Электронный доступ к коллекции из 15 журналов базы данных компании Американского физического общества (APS). База данных APS содержит журналы по ядерной физике, физике высоких энергий, астрофизике, математической физике, механике и др.: [сайт]. – URL: <https://www.aps.org/> (дата обращения: 12.09.2022).

2. Электронный доступ к коллекции из 17 журналов базы данных компании AIP Publishing LLC (AIP). Тематические рубрики изданий включают основные разделы физики и смежных областей знания: [сайт]. – URL: <https://www.aip.org/> (дата обращения: 12.09.2022).

3. Электронный доступ и использование баз данных журналов компании IOP PUBLISHING LIMITED: База данных журнала Nuclear Fusion: [сайт]. – URL: <https://www.iop.org/> (дата обращения: 12.09.2022).

4. Электронный доступ к журналам и книгам издательства Elsevier на платформе ScienceDirect. Коллекция журналов Complete Freedom Collection: [сайт]. – URL: <http://info.sciencedirect.com/techsupport/journals/freedomcoll.htm> (дата обращения: 12.09.2022).

5. Электронный доступ к журналам, книгам и базам данных издательства Springer_Nature: [сайт]. – URL: <https://www.springernature.com/gp> (дата обращения: 12.09.2022).

6. Электронный доступ к базе данных Cambridge Crystallographic Data Centre. База данных Кембриджского центра структурных данных CSD-Enterprise содержит данные о строении кристаллических органических и элементарноорганических соединений (800 000 структур, он-лайн и офф-лайн версии), комплекс программ для работы с ними для биологов, химиков и кристаллографов: [сайт]. – URL: <https://www.ccdc.cam.ac.uk/> (дата обращения: 12.09.2022).

VI. Электронный доступ к следующим изданиям:

1. Web of Science (авторитетная политематическая реферативно-библиографическая и наукометрическая (библиометрическая) база данных: [сайт]. – URL: <https://webofknowledge.com/> (дата обращения: 12.09.2022).

2. Scopus (мультидисциплинарная библиографическая и реферативная база данных и инструмент для отслеживания цитируемости статей, опубликованных в научных изданиях): [сайт]. – URL: <https://www.scopus.com/search/form.uri?display=basic#basic> (дата обращения: 12.09.2022).

3. Коллекция журналов Wiley (более 1600 изданий) с глубиной архива с 1997 г. по текущий момент: [сайт]. – URL: <https://www.wiley.com/> (дата обращения: 25.09.2022).

4. Science (один из самых авторитетных научных журналов Американской ассоциации содействия развитию науки): [сайт]. – URL: <https://www.science.org/> (дата обращения: 17.09.2022).

5. Institute of Physics (охватывает три направления области физики: образование, исследования и разработки): [сайт]. – URL: <https://www.iop.org/> (дата обращения: 15.08.2022).

6. Электронный доступ к архивам научных журналов: Annual Reviews: [сайт]. – URL: <https://www.annualreviews.org/> (дата обращения: 12.09.2022).

7. Cambridge University Press: [сайт]. – URL: <https://www.cambridge.org/core> (дата обращения: 21.06.2022).

8. Nature: [сайт]. – URL: <https://www.nature.com/> (дата обращения: 13.08.2022).

9. Oxford University Press: [сайт]. – URL: <https://global.oup.com/?cc=ru> (дата обращения: 12.09.2022).

10. SAGE Publications: [сайт]. – URL: <https://us.sagepub.com/en-us/nam/home> (дата обращения: 03.09.2022).

11. Science Magazine: [сайт]. – URL: <https://www.science.org/> (дата обращения: 14.09.2022).

12. Springer Journals Archiv с 1832 - 1996 гг.: [сайт]. – URL: <https://link.springer.com/> (дата обращения: 22.08.2022).

13. Taylor&Francis: [сайт]. – URL: <https://taylorandfrancis.com/> (дата обращения: 12.09.2022).

14. Wiley: [сайт]. – URL: <https://www.wiley.com/> (дата обращения: 12.09.2022).

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

1. При освоении дисциплины необходимы стандартная учебная аудитория с доской, ноутбук, мультимедийный проектор, экран. Аспирантам должен быть обеспечен доступ к сети Интернет и свободный доступ к библиотеке периодических изданий по предмету (в том числе и к электронным изданиям).

2. Лекции проводятся в стандартной аудитории, оснащенной в соответствии с требованиями преподавания теоретических дисциплин.