

**Паспорт научной специальности 1.3.17. «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества»
(отрасль науки – химические)**

Область науки:

1. Естественные науки

Группа научных специальностей:

1.3. Физические науки

Наименование отрасли науки, по которой присуждаются ученые степени:

Физико-математические

Технические

Химические

Шифр научной специальности:

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

Направления исследований:

1. Атомно-молекулярная структура химических частиц и веществ, механизмы химического превращения, молекулярная, энергетическая, химическая и спиновая динамика элементарных процессов, теории скоростей химических реакций и экспериментальные методы исследования структуры и динамики химических превращений, в том числе в межзвездной среде.

2. Пространственное и электронное строение, атомно-молекулярные параметры и спектральные характеристики изолированных атомов и молекул, а также их ионов; структура и свойства вандерваальсовых комплексов, ритберговских молекул, кластеров, ассоциатов, пленок, адсорбционных слоев, интеркалятов, межфазных границ, мицелл, дефектов; структура и свойства кристаллов, аморфных тел, жидкостей; поведение веществ и структурно-фазовые переходы в экстремальных условиях – в электрических и магнитных полях, в условиях статического и динамического сжатия, в полях лазерного излучения, в плазме и в гравитационных полях, при сверхнизких температурах и в других условиях.

3. Молекулярная динамика, межмолекулярные потенциалы и молекулярная организация веществ; компьютерное моделирование как метод изучения структуры и динамики многоатомных систем; динамические теории в описании упругости, релаксации, пластической деформации, теплопроводности, реологии; динамика фазовых переходов.

4. Селективное заселение возбужденных электронных, колебательных и вращательных состояний молекул; обмен и передача энергии между различными состояниями внутри молекулы и межмолекулярный энергетический обмен; релаксация внутренней энергии в кинетическую и в энергию решетки; особенности энергетической динамики в газах, кластерах,

жидкостях, твердых телах и межфазных границах; энергетика химических реакций и механизмы запасания энергии в молекулах.

5. Поверхности потенциальной энергии взаимодействующих атомно-молекулярных частиц, квантово-химические методы их расчета; динамика движения реагентов на потенциальной поверхности; методы динамических траекторий и статические теории скоростей химических реакций; туннельные эффекты в химической динамике; превращение энергии в элементарных процессах и химические лазеры; химические механизмы реакций и управление реакционной способностью; когерентные процессы в химии, когерентная химия – квантовая и классическая; спиновая динамика и спиновая химия; лазерно-индуцированная химия и фемтохимия; молекулярная спектроскопия высокого и сверхвысокого разрешения, химия одиночных молекул и кластеров; экспериментальные методы исследования химической, энергетической и спиновой динамики.

6. Прецизионные расчеты строения, свойств и спектральных характеристик экзотических, высокоактивных, модельных и практически важных соединений, экспериментальное изучение которых сильно затруднено или невозможно в современных лабораторных условиях.

7. Теоретический анализ специфики строения и превращений возбужденных (электронных, колебательных и вращательных) состояний молекул и молекулярных систем, анализ устойчивости метастабильных соединений, в том числе соединений с высоким запасом энергии.

8. Анализ и компьютерное моделирование строения, свойств и спектральных характеристик молекул и веществ в электромагнитных полях различной напряженности, частоты и периодичности воздействия, в акустических полях, полях механических напряжений, при сверхвысоких давлениях и температурах, при радиационном воздействии и т.п.

9. Строение, структура и реакционная способность интермедиатов химических реакций; химические механизмы и физика каталитических процессов; динамика, структура и спектроскопия каталитически активных поверхностей.

10. Закономерности и механизмы распространения, структура, параметры и устойчивость волн горения, детонации, взрывных и ударных волн; связь химической и физической природы веществ и систем с их термохимическими параметрами, характеристиками термического разложения, горения, взрывчатого превращения; термодинамика, термохимия и макрокинетика процессов горения и взрывчатого превращения;

11. Процессы аналоги горения, детонации и взрыва; взаимодействие волн горения и взрывчатого превращения со средой, объектами и веществами; явления, порождаемые горением и взрывчатым превращением; процессы горения и взрывчатого превращения в устройствах и аппаратах для производства энергии, работы, получения веществ и продуктов; управление процессами горения и взрывчатого превращения;

12. Вопросы пожаро- и взрывобезопасности веществ, материалов, процессов.

Смежные специальности (в рамках группы научной специальности):
1.4.4. Физическая химия