

## Паспорт научной специальности 1.4.4. «Физическая химия»

Область науки:

Естественные науки

Группа научных специальностей:

1.4. Химические науки

Наименование отрасли науки, по которой присуждаются ученые степени:

Химические

Технические

Физико-математические

Шифр научной специальности:

1.4.4. Физическая химия

Направления исследований:

1. Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений, а также их спектральных характеристик.
2. Экспериментальное определение термодинамических свойств веществ, расчет термодинамических функций простых и сложных систем, в том числе на основе методов статистической термодинамики, изучение термодинамических аспектов фазовых превращений и фазовых переходов.
3. Определение термодинамических характеристик процессов на поверхности, установление закономерностей адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях.
4. Теория растворов, межмолекулярные и межчастичные взаимодействия. Компьютерное моделирование строения, свойств и спектральных характеристик молекул и их комплексов в простых и непростых жидкостях, а также ранних стадий процессов растворения и зародышеобразования.
5. Изучение физико-химических свойств изолированных молекул и молекулярных соединений при воздействии на них внешних электромагнитных полей, потока заряженных частиц, а также экстремально высоких/низких температурах и давлениях.
6. Химические превращения, потоки массы, энергии и энтропии пространственных и временных структур в неравновесных системах.
7. Макрокинетика, механизмы сложных химических процессов, физикохимическая гидродинамика, растворение и кристаллизация.
8. Динамика элементарного акта химических реакций. Механизмы реакции с участием активных частиц.
9. Связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями протекания химической реакции.

10. Создание и разработка методов компьютерного моделирования строения и механизмов превращений химических соединений на основе представлений квантовой механики, различных топологических и статистических методов, включая методы машинного обучения, методов молекулярной механики и молекулярной динамики, а также подходов типа структура-свойства.
11. Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, реакционной способности и динамике превращений химических соединений, находящихся в различном окружении, в том числе в кластерах, клатратах, твердых и жидкокристаллических матрицах, в полостях конденсированных среды и белковом окружении.
12. Физико-химические основы процессов химической технологии и синтеза новых материалов.

Смежные специальности (в т.ч. в рамках группы научной специальности)\*:

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

1.4.3. Органическая химия

1.4.14. Кинетика и катализ