Шифр специальности:

01.04.17 Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Формула специальности:

Химическая физика – раздел науки, пограничный между химией и физикой, имеющий задачей применение теоретических и экспериментальных методов физики для исследования химических проблем как в классической химии, так и в связанных с ней науках. Физика горения и взрыва – раздел химической физики, касающийся теоретических и экспериментальных исследований быстропротекающих химических и физико-химических превращений веществ и систем в процессах термического разложения, горения, взрыва, детонации. Объектами исследований химической физики горения и взрыва являются все виды взрывчатых веществ, порохов, ракетных топлив, пиротехнических и взрывчатых систем, их компоненты, горючие газы, жидкости, синтетические и природные горючие материалы и системы. Значение решения научных и технических проблем химической физики состоит в фундаментальных исследованиях природы, решении обширного круга народно-хозяйственных задач, направленных на укрепление экономического потенциала и оборонной безопасности страны.

Области исследований:

1. Атомно-молекулярная структура химических частиц и веществ, механизмы химического превращения, молекулярная, энергетическая, химическая и спиновая динамика элементарных процессов, физика и физические теории химических реакций и экспериментальные методы исследования химической структуры и динамики химических превращений.
2. Пространственное и электронное строение, атомно-молекулярные параметры изолированных атомов, ионов, молекул; структура и свойства вандерваальсовых молекул, 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; компьютерная молекулярная динамика как метод диагностики структуры и динамики веществ; динамические теории в описании упругости, релаксации, пластической деформации, теплопроводности, реологии; динамика фазовых переходов.

4. Энергетическая динамика и селективное заселение электронных, колебательных и вращательных состояний; 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 химических реакций и квантовые методы их расчета; динамика движения реагентов на потенциальной поверхности; методы динамических траекторий и статические теории 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; фемтохимия; спектроскопия и химия одиночных молекул и кластеров; экспериментальные методы исследования химической, энергетической и спиновой динамики.
6. Строение, структура и реакционная способность интермедиатов химических реакций; химические механизмы и физика каталитических процессов; динамика, структура и спектроскопия каталитически активных поверхностей.
7. 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;
8. 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;
9. Вопросы пожаро- и взрывобезопасности веществ, материалов, процессов.

Отрасль наук:

технические науки
химические науки
физико-математические науки