

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

**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, 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;

**Смежные специальности (в т.ч. в рамках группы научной специальности)<sup>1</sup>:**

1.3.14. Теплофизика и теоретическая теплотехника

---

<sup>1</sup>Для рекомендации научных специальностей в создаваемых диссертационных советах