

Паспорт научной специальности 1.4.4. «Физическая химия»

Область науки:

1. 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, физико-химическая 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:

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

1.4.3. Органическая химия

1.4.14. Кинетика и катализ

¹Для рекомендации научных специальностей в создаваемых диссертационных советах

Паспорт научной специальности 1.4.6. «Электрохимия»

Область науки:

1. Естественные науки

Группа научных специальностей:

1.4. Химические науки

Наименование отрасли науки, по которой присуждаются ученые степени:

Химические

Физико-математические

Технические

Шифр научной специальности:

1.4.6. Электрохимия

Направления исследований:

1. Термодинамические и транспортные свойства жидких и твердых ион-проводящих систем, электрон- и/или ион-проводящих полимеров, интеркаляционных соединений, электроактивных полимерных, неорганических, органических и композитных материалов.

2. Гомогенные химические реакции с переносом заряда.

3. Структура заряженных межфазных границ. Теория двойного электрического слоя. Адсорбционные явления. Электрохимия двумерных систем. Квантохимическое и молекулярно-статистическое моделирование.

4. Динамика процессов на межфазных границах (кинетика элементарных стадий электродных процессов, кинетика адсорбционных и хемосорбционных процессов, теория переноса электрона и ионов через границу раздела фаз, электрохимическая интеркаляция). Электродкатализ. Электрохимические процессы на пористых электродах, макрокинетика электродных процессов. Трехмерные проточные электроды.

5. Механистические и молекулярные аспекты многостадийных электрохимико-химических процессов с участием неорганических, металлорганических и органических веществ; синтетические приложения. Транспортные явления в жидких и твердых средах; диффузионный, миграционный и конвективный перенос; вынужденная и естественная конвекции; стационарные и переменного-токовые процессы; смешанный транспортно-кинетический режим протекания процессов; макро- и микро/нанoeлектроды. Развитие аналитических и численных методов анализа транспортных электрохимических процессов.

6. Равновесные и динамические явления на полупроводниковых электродах, в сенсibilизированных наноразмерных системах и наногетерогенных композициях. Фотоэлектрохимические процессы и устройства. Электрохимические методы преобразования солнечной энергии.

7. Электрохимия мембран. Явления переноса ионов и молекул в мембранных системах. Электродиализ, обратный осмос, опреснение воды и другие электромембранные процессы. Очистка растворов. Электрокинетические явления. Ион-селективные электроды.

8. Электрохимические аспекты коррозии и защиты от коррозии; пассивность. Теория и приложения процессов осаждения металлов, сплавов и др. неорганических материалов, образования и растворения фаз; процессы электроосаждения, травления электрополировки, электрохимического формообразования, микро- и наноструктурирование поверхности. Темплатные и безмасковые процессы локального электрохимического осаждения, растворения и оксидирования металлов и полупроводников.

9. Фундаментальные и прикладные аспекты процессов, составляющих основу электрохимических производств. Экспериментальные исследования и моделирование электрохромных систем, электрохимических сенсоров, электролизеров, преобразователей тока и др. устройств и реакторов. Электрофлотационные явления и их применения.

10. Электрохимическая генерация, передача и хранение энергии; оптимизация электролитов, электродных материалов, сепараторов и мембран. Теория, исследование и моделирование химических источников тока (первичных элементов, аккумуляторов, топливных элементов, суперконденсаторов, проточных редокс-батареи). Устройства для преобразования и временного запасания электрической энергии.

11. Редокс-процессы с участием компонентов биологических систем; электрохимия биомембран и их моделей; электрохимические биосенсоры; приложения электрохимических методов в биологии и медицине.

12. Микро- и наноэлектрохимия, электрохимическая нанотехнология.

13. Электрохимия органических соединений и полимеров. Электросинтез функционального назначения.

14. Развитие экспериментальных методов анализа электрохимических систем. Теоретические основы электрохимических, электроаналитических и комбинированных методов.

Смежные специальности (в рамках группы научной специальности)¹:

1.4.3. Органическая химия

1.4.4. Физическая химия

¹Для рекомендации научных специальностей в создаваемых диссертационных советах

Паспорт научной специальности 2.6.9. «Технология электрохимических процессов и защита от коррозии»

Область науки:

2. Технические науки

Группа научных специальностей:

2.6. Химические технологии, науки о материалах, металлургия

Наименование отрасли науки, по которой присуждаются ученые степени:

Технические

Химические

Шифр научной специальности:

2.6.9. Технология электрохимических процессов и защита от коррозии

Направления исследований:

1. Теоретические основы электрохимических и химических процессов коррозии, электроосаждения, электросинтеза, электролиза и процессов, протекающих в химических источниках электрической энергии.
2. Электрохимические, химические, физические, биологические и комбинированные методы защиты конструкционных материалов от коррозии.
3. Электрохимические, химические, физические и комбинированные методы обработки поверхности материалов и нанесения покрытий. Гальванопластика и гальваностегия.
4. Технология электрохимического синтеза органических и неорганических веществ, электролиза, электрорафинирования и электроэкстракции. Электромембранные и электрофорезные технологии.
5. Структура, защитные, механические, декоративные и другие свойства коррозионно-стойких материалов и защитных покрытий.
6. Приборы и оборудование для исследований и реализации электрохимических и противокоррозионных технологий и мониторинга коррозионных процессов.
7. Создание новых и совершенствование традиционных химических источников электрической энергии.
8. Экологические вопросы коррозии, противокоррозионных и электрохимических технологий. Очистка, регенерация, обезвреживание и утилизация отходов электрохимических производств и использование отходов в противокоррозионной технике.
9. Автоматизация и цифровизация электрохимических и противокоррозионных технологий.

Смежные специальности (в т.ч. в рамках группы научной специальности)¹:

2.6.5. Порошковая металлургия и композиционные материалы

2.6.17. Материаловедение

¹Для рекомендации научных специальностей в создаваемых диссертационных советах