



ПРОГРАММА АСПИРАНТУРЫ

«Физическая химия»

Научная специальность 1.4.4 «Физическая химия» (химические,
науки)

Выпускающая кафедра (подразделение): ИФИБ

Форма обучения: очная

Срок обучения: 4 года

Куратор программы: Савченко Алла Юрьевна, e-mail AYSavchenko@mephi.ru

Цель программы:

Целью программы аспирантуры является подготовка аспирантом диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук в области физической химии.

Направление научных исследований:

- Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений, а также их спектральных характеристик.
- 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.
- Определение термодинамических характеристик процессов на поверхности, установление закономерностей адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях.
- 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.
- 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.
- Химические превращения, потоки массы, энергии и энтропии пространственных и временных структур в неравновесных системах.
- Макрокинетика, механизмы сложных химических процессов, физико-химическая гидродинамика, растворение и кристаллизация.
- Динамика элементарного акта химических реакций. Механизмы реакции с участием активных частиц.
- Связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями протекания химической реакции.
- 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.
- 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.
- Физико-химические основы процессов химической технологии и синтеза новых материалов.