Шифр специальности:

02.00.17 Математическая и квантовая химия

Формула специальности:

Математическая и квантовая химия – теоретический раздел химической науки, использующий математические методы и квантовую механику для разработки математических и квантово-химических моделей электронного и пространственного строения молекул и химических веществ. Она использует также широкий спектр закономерностей, установленных в различных разделах химии и обобщающих экспериментальную информацию о свойствах химических соединений. Математическая и квантовая химия составляет основу современного учения о строении молекул и динамике их превращений, о строении и химических превращениях веществ. Математическая и квантовая химия включает создание и разработку математических методов и моделей строения и механизмов превращений химических соединений на основе представлений и методов квантовой механики, различных топологических методов, в частности теории графов, методов линейной алгебры, методов молекулярной механики и молекулярной динамики, а также методов нелинейной динамики. К математической и квантовой химии относятся также разделы современной химической термодинамики и химической кинетики в той их части, которая связана с поиском и развитием новых математических моделей и методов описания свойств и превращений веществ. В круг объектов исследований математической и квантовой химии входят прежде всего молекулярные системы (молекулы, их ионы, ассоциаты и кластеры, клатраты и т.п), а также фрагменты протяженных систем в основных и возбужденных состояниях, для которых необходимо установить их электронное строение, механизмы и динамику переноса энергии и заряда при различных химических процессах. К этому кругу объектов относятся и вещества в конденсированном состоянии, в том числе кристаллические и аморфные твердые тела. Наряду с рассмотрением свободных систем в задачи математической и квантовой химии входит теоретическое исследование поведения молекулярных систем в различных средах, в том числе в матрицах, в электромагнитных, акустических и других полях, а также в веществах, находящихся в экстремальных условиях.

Объектами математической и квантовой химии служат также математические методы и математические модели современной химии как на молекулярном, так и на макроскопическом уровне.

Области исследований:

1. Разработка новых моделей, математических методов, алгоритмов и программ расчета строения, свойств и превращений химических соединений

на основе представлений квантовой теории и различных методов современной математики, в частности математического моделирования.

2. Развитие ныне существующих методов квантовой и математической химии. Изучение областей применимости этих методов и достоверности получаемых результатов расчетов в различных приближениях.

3. Получение данных об электронной структуре, потенциальных поверхностях, реакционной способности и динамике превращений химических соединений на основе методов квантовой химии и математического моделирования. Прецизионные расчеты реперных соединений и практически важных соединений, экспериментальное изучение которых сильно затруднено или невозможно в современных условиях.

4. Моделирование поведения молекул, находящихся в различном окружении, в том числе в кластерах, клатратах, твердых и жидкокристаллических матрицах и в полостях конденсированных сред.

5. Применение методов математической и квантовой химии для установления закономерностей строения и динамики превращений химических соединений, в частности в различных классах и рядах соединений.

6. Теоретический анализ специфики строения и превращений возбужденных (электронных, колебательных и вращательных) состояний молекулярных систем, анализ устойчивости метастабильных соединений, в том числе соединений с высоким запасом энергии.

7. Анализ и моделирование поведения молекул и веществ в электромагнитных полях различной интенсивности, частоты и периодичности воздействия, в акустических полях, полях механических напряжений, при сверхвысоких давлениях и температурах, при радиационном воздействии и т.п.

Отрасль наук:

химические науки
физико-математические науки