



Миненков  
Юрий  
Валерьевич

Yury.Minenkov@chph.ras.ru

PhD (к.х.н.), в.н.с

Ссылки на научные профили:

\* ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8993-056X>

\* Scopus Author ID: 6701758982

\* ResearcherID: [C-7458-2018](https://orcid.org/0000-0001-8993-056X)

\* Google Scholar Profile:

<https://scholar.google.com/citations?user=GxFjLTUAAAAJ&hl=en>

\* ResearchGate Profile:

<https://www.researchgate.net/profile/Yury-Minenkov>

\* CoLab:

<https://colab.ws/researchers/R-35F4F-0EAA7-UN74G>

**Специальность:** *Физическая химия (1.4.4)*

**Область научных интересов:** 1. Предсказание термодинамических характеристик веществ в газовой фазе из первых принципов. 2. Квантово-химическое моделирование процессов сольватации ионов. 3. Разработка программного обеспечения для: а) проведения конформационного поиска и сэмплинга; б) расчета термодинамики сольватации нейтральных молекул.

**Предлагаемые тематики диссертационных работ для аспирантов:**

Тема: Предсказание термодинамики сольватации ионов щелочных металлов из первых принципов.

Краткое описание темы: В рамках мономерного цикла кластерно-континуумной модели сольватации будут определены энергии Гиббса сольватации ионов  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$  и  $\text{K}^+$  в ряде растворителей, используемых в химических источниках тока. Во-первых, будет проведен конформационный анализ кластеров ионов щелочных металлов с молекулами растворителя. Во-вторых, будет определено оптимальное количество молекул растворителя для явного рассмотрения. В-третьих, с помощью высокоуровневых приближений квантовой химии и методов статистической термодинамики будут определены термодинамические характеристики образования сольватированных ионов в газовой фазе и растворе.

**Требования к потенциальным аспирантам:**

Специализация по диплому:

Химия/Физическая Химия/Физика

Необходимые базовые знания и навыки:

- Знание основ физической и квантовой химии.

- Владение компьютером на уровне продвинутого пользователя.

- Знание английского языка на уровне чтения научной литературы.

Личные качества, которые Вы цените в аспирантах:

Интерес к науке, ответственность, высокая работоспособность, критическое мышление.

**Перспективы и возможности для аспиранта в рамках работы над проектом:**

- Решение интересных задач, позволяющих раскрыть творческий потенциал.

- Публикация результатов в ведущих российских и зарубежных рецензируемых научных журналах.

- Официальное трудоустройство в ФИЦ ХФ РАН после прохождения испытательного срока.

- Участие в конференциях и грантах, научные стажировки.