

Поскрёбышев  
Григорий  
Анатольевич

gposkr@chph.ras.ru

Кандидат химических наук,  
ведущий научный сотрудник

Ссылки на научные профили:

63 публ. ORCID: 0000-0002-8920-7037 [<https://orcid.org/0000-0002-8920-7037>]

57 публ. Scopus Author ID: 6602457429  
[<https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602457429>]

57 публ. ResearcherID: [I-9122-2016](https://www.researcherid.com/rid/I-9122-2016)  
[<https://www.webofscience.com/wos/author/record/I-9122-2016>]

\* Google Scholar Profile: [ссылка]

83 публ. ResearchGate Profile:  
[<https://www.researchgate.net/profile/Gregory-Poskrebyshv>]

**Специальность** (выбрать актуальное):

*Химическая физика (1.3.17)*

*Физическая химия (1.4.4)*

*Кинетика и катализ (1.4.14)*

**Область научных интересов:** использование современных методов молекулярного моделирования для разработки кинетических моделей пиролиза, окисления и горения компонентов биомасел; моделей окисления и распада алюминий и борорганических соединений; модели абиогенезиса; влияния антропогенных выбросов на химию атмосферы. Развитие методологии более точного расчёта термодинамических величин с использованием молекулярного моделирования.

**Предлагаемые тематики диссертационных работ для аспирантов:**

Тема 1. Создание физико-химической модели окисления и пиролиза компонентов бионефти:

Краткое описание Темы 1:

Цель - с помощью современных методов молекулярного моделирования определить детальный механизм окисления и/или пиролиза компонентов бионефти.

Задачи:

А. Расчёт термодинамических свойств промежуточных и конечных продуктов окисления и пиролиза.

Б. Составление механизма.

В. Расчёт констант скорости реакций включённых в предлагаемый механизм.

Тема 2. Роль  $\text{NH}_2\text{C}(\text{O})$  и  $\text{NH}_2\text{COC}(\text{O})\text{H}$  в абиогенном синтезе нуклеотидных оснований в условиях предбиогенной атмосферы:

Краткое описание Темы 2:

Цель - с помощью современных методов молекулярного моделирования определить возможные пути превращения  $\text{NH}_2\text{C}(\text{O})$  и  $\text{NH}_2\text{COC}(\text{O})\text{H}$  в нуклеотидные основания.

Задачи:

А. Расчёт физико-химических свойств продуктов образованных в реакциях с участием  $\text{NH}_2\text{C}(\text{O})$  и  $\text{NH}_2\text{COC}(\text{O})\text{H}$  в условиях предбиогенной атмосферы.

Б. Определение путей ведущих к образованию нуклеотидных оснований.

В. Расчёт констант скорости рассматриваемых реакций.

Тема 3. Создание физико-химической модели окисления и распада алюминий органических соединений:

Краткое описание Темы 1:

Цель - с помощью современных методов молекулярного моделирования определить детальный механизм окисления и распада алюминий органических соединений.

Задачи:

А. Расчёт термодинамических свойств промежуточных и конечных продуктов окисления и распада.

Б. Составление механизма.

В. Расчёт констант скорости реакций включённых в предлагаемый механизм.

Г. Валидация предложенного механизма и уточнение кинетических параметров реакций.

**Требования к потенциальным аспирантам:**

Специализация по диплому:

Физическая химия (кинетика и термодинамика), органическая химия, химические технологии.

Необходимые базовые знания и навыки:

Основы органической химии, химической термодинамики, химической кинетики. Базовое владение английским языком (чтение и понимание содержания научной литературы).

Личные качества, которые Вы цените в аспирантах:

Любознательность, трудолюбие, ответственность, обучаемость, целеустремленность, аналитическое мышление.

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

Участие в конференциях, публикация результатов работ в научных журналах, участие в заявках на гранты РФ (доп. финансирование), потенциальное трудоустройство в ФИЦ ХФ РАН после защиты.

**Требования:** Заинтересован в сотрудничестве с аспирантами, интересующимися молекулярным моделированием в рамках научных направлений руководителя работ и готовых выполнять (теоретические, экспериментальные, прикладные, фундаментальные) исследования в этой области.