

ОТЗЫВ

на автореферат кандидатской диссертации Анатолия Николаева «ДИНАМИКА РЕАКЦИЙ C_nR РАДИКАЛОВ С ПРОСТЕЙШИМИ АЛКЕНАМИ И АЛКАДИЕНАМИ В УСЛОВИЯХ ЕДИНИЧНЫХ СТОЛКНОВЕНИЙ»

Высокореакционноспособные радикалы с единой химической формулой C_nR , где R – функциональная группа (для метина (CH) – $n=1$, $R=H$; для бутадиинила (C_4H) – $n=2$, $R=C_2H$; для пропина (C_3H_3) – $n=2$, $R=CH_3$) способны активно взаимодействовать, особенно с ненасыщенными углеводородами, например, с алкенами и алкадиенами, и приводить к синтезу циклических соединений. Однако эти реакции слабо изучены. Их значение определяется тем, что они являются первым этапом в образовании полициклических ароматических углеводородов (ПАУ). Механизмы формирования и роста ПАУ в газовой фазе активно разрабатываются учеными во многих лабораториях мира, проводящих исследования по физике и химии горения и межзвездной среды. В земных условиях ПАУ и вырастающие из них частички сажи нарабатываются, в основном, в ходе антропогенного сжигания углеводородного топлива, загрязняют окружающий воздух и вызывают различные заболевания, поэтому их содержание в выхлопе строго регламентируется Международными нормами. Во внеземных условиях ПАУ играют значительную роль в астробиологической эволюции межзвездной среды, исследование механизмов низкотемпературного роста ПАУ может пролить свет на процессы образования сложных органических молекул, которые могли привести к зарождению жизни во Вселенной. В связи с этим не вызывает сомнения актуальность рассматриваемой диссертационной работы, посвященной исследованию раскрытия динамики бимолекулярных реакций $CH+C_4H_6$, $C_4H+C_4H_6/C_5H_8$ и $C_3H_3+C_3H_6/C_4H_8/C_5H_8$ в условиях единичных столкновений, приводящих к образованию первичных циклических соединений, с помощью *ab initio* квантово-механических расчетных методов высокого уровня и нахождения кинетических констант мономолекулярных преобразований с использованием теории переходного состояния Райса-Рамспергера-Касселя-Маркуса (РРКМ).

При проведении этих исследований диссертант получил ряд новых важных научных результатов. Впервые раскрыты механизмы бимолекулярных реакций метина (CH) с 1,3-бутадиеном (C_4H_6) и бутадиинила (C_4H) с 1,3-бутадиеном (C_4H_6) и 2-метил-1,3-бутадиеном (C_5H_8), ведущих к циклопентадиену (C_5H_6), а также к фенил- и толил-ацетиленам (C_8H_6/C_9H_8). Найдены геометрии и относительные энергии стационарных структур на поверхностях потенциальной энергии в реакциях 1-пропина (C_3H_3) с пропеном (C_3H_6) и 1- и 2-метилпропенами (C_4H_8). Определены пути формирования метил-, диметил- и триметилзамещенных производных винилацетилена (C_4H_4) в конкурирующих каналах H и CH_3 . Установлены механизмы образования диметилзамещенных бензолов (m- и p-ксилолов) при взаимодействии 1-пропина (C_3H_3) с 2-метил-1,3-бутадиеном (C_5H_8). Обнаружено влияние позиции CH_3 группы в 1- и 2-метил-1,3-бутадиенах (C_5H_8) на динамику реакций данных изомеров с 1-пропином (C_3H_3) в условиях единичных столкновений.

Практическая значимость полученных результатов заключается в том, что они несомненно, будут использованы для пополнения баз данных кинетических констант реакций при различных условиях горения. Подробные механизмы реакций, вычисленные константы скоростей и полученные процентные выходы на продукты будут востребованы

разработчиками камер сгорания энергетических установок, работающих на углеводородном топливе. Полученные данные помогут в создании двигателей с низкой эмиссией вредных веществ и разработке типов топлив с меньшим количеством несгораемых ПАУ и сажи, уменьшая таким образом загрязнение окружающей среды. Также результаты исследования найдут применение в астрофизических моделях, где они помогут описывать эволюцию органических соединений на различных космических объектах, таких как планеты, звезды и межзвездная среда.

Основным замечанием по содержанию автореферата является то, что в нем недостаточно внимания уделено сопоставлению полученных теоретических результатов с известными экспериментальными данными, выработке практических рекомендаций по использованию полученных результатов в организации процессов горения.

Однако это замечание не имеет существенного значения. В целом работа выполнена на высоком научном уровне с использованием самых современных теоретических методов. Ее результаты являются новыми, достоверными и вносят важный вклад в развитие теории горения и углубление понимания фундаментальных процессов химической физики. Диссертация удовлетворяет требованиям п. 9 к кандидатским диссертациям Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 года № 842. Автор диссертации, Николаев Анатолий, достоин присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17. Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Автор отзыва дает согласие на обработку персональных данных.

Зав. кафедрой «Металловедение, порошковая металлургия, наноматериалы» ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет», доктор физико-математических наук (01.04.17 – Химическая физика, в том числе физика горения и взрыва), профессор

Амосов
Александр Петрович

Тел. (846) 242-28-89. E-mail: egundor@yandex.ru.
443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244, главный корпус.

Подпись А.П. Амосова удостоверяю.
Ученый секретарь ФГБОУ ВО «СамГТУ»
доктор технических наук

05.11.2025



Ю.А. Малиновская