

ОТЗЫВ

научного руководителя доцента, д.ф.-м.н. Аязова Валерия Николаевича
о диссертационной работе Николаева Анатолия на тему:
«Динамика реакций C_nR радикалов с простейшими алкенами и алкадиенами
в условиях единичных столкновений»,

представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Николаев Анатолий, 1996 года рождения, в 2021 году окончил с отличием физический факультет Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева» (Самарский университет) по направлению подготовки 03.04.02 «Физика» (профиль: Химическая физика). С 2021 по 2025 год обучался в очной аспирантуре федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева» по направлению подготовки 03.06.01 «Физика и астрономия» с присвоением квалификации «Исследователь. Преподаватель-исследователь». В период с 2021 по 2024 год работал высококвалифицированным младшим научным сотрудником (в/к м.н.с) лаборатории физико-химической кинетики (ЛФХК) в Самарском филиале Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук (СФ ФИАН), с 2024 года по настоящее время работает в/к м.н.с в Центре лабораторной астрофизики (ЦЛА) СФ ФИАН, а с 2025 года по совместительству м.н.с. в научно-исследовательской лаборатории «Физика и химия горения» (НИЛ-101) в Самарском университете.

Научно-квалификационная работа (диссертация) Николаева Анатолия посвящена изучению динамики реакций углеводородных соединений, участвующих в формировании ароматических молекул или их предшественников в виде строительных блоков в таком эффективном механизме роста полициклических ароматических углеводородов (ПАУ), как «отрыв водорода и присоединений винилацетилена» (HAVA). Интерес ученых к ПАУ обусловлен двумя основными факторами. Во-первых, они пагубно влияют на состояние окружающей среды, загрязняя атмосферу планеты и почву, и, как следствие, вызывая негативное воздействие на живые организмы. Во-вторых, ПАУ задействованы в процессах формирования сложных органических молекул (СОМ) на различных космических объектах, начиная от внешних оболочек умирающих звезд до молекулярно-пылевых облаков. Среди многообразия СОМ, обнаруженных за пределами Солнечной системы, немало тех, которые являются прекурсорами биомолекул, способных положить начало зарождению жизни во Вселенной. Актуальность научной работы Николаева А. обусловлена необходимостью разработок, создания и дополнения, а также уточнения достоверных кинетических моделей химических процессов в экстремальных условиях горения и космоса.

Николаев А. раскрыл механизмы химических превращений в системах $CN+C_4H_6$, $C_4H+C_4H_6/C_5H_8$ и $C_3H_3+C_3H_6/C_4H_8/C_5H_8$ в условиях единичных столкновений. Данные реакции изучались одновременно как экспериментально в скрещенных пучках в научной группе профессора Кайзера Р.И. из Гавайского университета на Маноа, так и теоретически с использованием современных квантово-химических расчетных методов. Такой комбинированный подход позволил разработать детальные реакционные механизмы с многочисленными интермедиатами, переходными состояниями и продуктами, участвующими в реакциях. В диссертации с использованием методов квантовой химии, обладающих точностью, сопоставимой с химической (1 ккал/моль), были найдены геометрии реагентов, продуктов, интермедиатов и переходных

состояний, вычислены относительные энергии всех структур и построены многочисленные диаграммы поверхности потенциальной энергии.

Было установлено, что в результате реакции 1,3-бутадиена (C_4H_6) с метиновым радикалом (CH) формируется циклопентадиен ($c-C_5H_6$) – важнейший предшественник неплоских ПАУ. Взаимодействие более сложного линейного бутадиинильного радикала (C_4H) с 1,3-бутадиенами (C_4H_6/C_5H_8) приводит к фенилацетилену (C_8H_6) или его мета- и пара-метилзамещенным производным, а реакция 1-пропинильного радикала (C_3H_3) с 2-метил-1,3-бутадиеном (C_5H_8) – к диметилзамещенным бензолом. Эти этинил- или метил-разветвленные ароматические соединения имеют прямое отношение к активно реагирующим резонансно стабилизированным свободным радикалам. Также было обнаружено, что в реакциях 1-пропина (C_3H_2) с пропенами (C_3H_6/C_4H_8) образуются метил-, диметил- и триметилзамещенные производные винилацетилена (C_4H_4), служащие строительными блоками в механизме НАВА.

По результатам исследований опубликованы 27 научных работ, в том числе 2 статьи в изданиях, рекомендованных ВАК России, и 12 статей – в ведущих рецензируемых журналах, индексируемых в международных базах данных Scopus и Web of Science. Все работы проходили апробации на всероссийских и международных научных конференциях, симпозиумах и конкурсах. Содержание диссертации достаточно точно отражено в опубликованных статьях.

Диссертация является завершенной научно-квалификационной работой, в которой содержится решение ряда задач расширения знаний о физике и химии в экстремальных условиях. Считаю, что диссертация Николаева А. отвечает всем требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, и выполнена в полном объеме, а автор Николаев Анатолий заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Директор
Самарский филиал ФГБУН
Физического института им. П.Н. Лебедева
Российской академии наук;
зав. кафедрой «Оптика и спектроскопия»
ФГАОУ ВО «Самарский национальный
исследовательский университет
имени академика С.П. Королева»
доктор физико-математических наук



Аязов В.Н.

Почта: azyazov@fian.smr.ru, телефон: +7 (927) 022-19-57