

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Гильдиной Анны Руслановны** «Кинетические константы процессов окисления циклопентадиенона и инденила для условий горения углеводородных топлив», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Исследование кинетики окисления различных углеводородов на уровне элементарных процессов в рамках расчетно-теоретических подходов высокой предсказательной способности безусловно представляет на сегодня магистральное направление в науке о горении. Оценка констант скорости элементарных химических реакций подразумевает как теоретическое исследование соответствующих поверхностей потенциальной энергии (ППЭ) с помощью методов квантовой химии, так и анализ динамики элементарного химического акта в рамках статистических методов, соответствующих задаче. Именно решению этих вопросов применительно к ряду реакций окисления ПАУ и посвящена данная диссертационная работа.

Существенными достоинствами работы являются: актуальность выбранного для исследования класса реакций (кинетика окисления ПАУ важна для понимания механизмов сажеобразования при горении), новизна (результаты получены автором вместе с коллегами впервые) и очевидная сложность (как методологическая, так и вычислительная) поставленных и решенных задач. При этом часть полученных результатов опубликована в ведущих международных журналах соответствующей тематики, что также свидетельствует о высоком уровне работы.

Помимо существенного фундаментального значения, практическая значимость работы также не вызывает сомнений, поскольку полученные результаты могут быть непосредственно использованы при моделировании процессов горения и сажеобразования в реальных горельных устройствах и их прототипах.

Вместе с тем, в работе и автореферате можно выделить ряд недостатков:

1. Несмотря на то, что в работе применяются хорошо известные теоретические методы, прогностическая способность которых была исследована и продемонстрирована ранее многими авторами, в Автореферате нет никакого обоснования, даже краткого, применения использованной квантово-химической методологии.
2. Также в Автореферате нет ни одного упоминания о каком-либо сравнении с экспериментом (ни по энергетике ППЭ, ни по величине констант скорости).

3. Нет упоминания о возможной неопределенности получаемых результатов, притом, что методология RRKM/ME подразумевает известный произвол в задании параметров релаксации колебательной энергии промежуточных комплексов. В этой связи кажется избыточной разрядность выдаваемых коэффициентов ветвления (с точностью до 0.01%!).
4. Бросаются в глаза погрешности оформления: почти полное отсутствие курсива для переменных (как в тексте, так и на рисунках), RamcПергер пишется через «П» и др.).
5. Журнал «Горение и взрыв» в настоящий момент уже вошел в перечень ВАК.

Однако указанные недостатки не являются препятствием для признания работы успешной. Исходя из автореферата и списка публикаций автора, диссертация А.Р. Гильдиной представляет собой законченное научное исследование на актуальную тему, имеет высокий уровень, заведомо соответствующий требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, результаты получены впервые. Полагаю, что её автор – **Анна Руслановна Гильдина**, безусловно, заслуживает присуждения ей учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

“5” ноября 2019 г.

Начальник сектора «Физико-химическая кинетика в газовых потоках» отделения «Неравновесные физико-химические процессы в газовых потоках и в элементах реактивных двигателей» ФГУП «Центральный институт авиационного моторостроения им. П.И. Баранова», к.ф.-м.н. (специальность: 01.02.05 - Механика жидкости, газа и плазмы)

Подпись А.С. Шарипова заверяю
Ученый секретарь ЦИАМ им. П.И. Баранова



Шарипов
Александр Сергеевич

Джамай Е. В.

Адрес: 111116, Москва, ул. Авиамоторная 2, ЦИАМ им. П.И. Баранова <http://ciam.ru>

Тел: +7 495 362-93-22, E-mail: assharipov@ciam.ru

Даю своё согласие на обработку персональных данных и включение их в аттестационное дело А.Р. Гильдиной.