

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

Важность и актуальность работы обусловлена тем, что в ближайшие десятилетия мировая экономика не сможет отказаться от использования углеводородного топлива для нужд энергетики, транспорта, промышленности, несмотря на все усилия, которые предпринимаются в последнее время на разных уровнях от межправительственных соглашений, до проведения ориентированных НИР и НИОКР по реализации «безуглеродной» экономики. В связи с этим на первый план выходят вопросы снижения вредных выбросов, появляющихся в ходе окисления углеводородных видов топлив. Одним из ключевых элементов в формировании вредных выбросов являются полициклические ароматические углеводороды. С одной стороны, полициклические ароматические углеводороды сами представляют вредные выбросы, с другой стороны, хорошо известно, что в процессе горения углеводородных топлив полициклические ароматические углеводороды играют роль прекурсоров формирования сажи. В связи с этим одной из главных задач, которую необходимо решить для снижения формирования вредных продуктов горения, является развитие детального знания о процессах формирования и окисления полициклических ароматических углеводородов в пламени.

Несмотря на то, что общие закономерности сажеобразования в процессе эволюции полициклических ароматических углеводородов достаточно хорошо изучены, детальные механизмы реакции образования, роста и окисления полиароматических соединений включают множество элементарных стадий, для которых на сегодняшний день мы обладаем весьма скудными данными относительно констант реакции. Восполнение данного пробела является одной из наиболее важных фундаментальных задач в области химии процессов горения, решение которой необходимо для создания технологий «чистого горения». Работа Гильдиной Анны Руслановны лежит в данном русле и направлена на исследование путей реакции и зависящих от температуры и давления констант скоростей и коэффициентов ветвления для реакций 5-ти членных соединений C_5H_4O и C_5H_5 , а также двуциклических ароматических углеводородов - C_9H_6O и C_9H_7 на основе квантово-механических *ab initio* методов и методов статистической физики.

В работе получен ряд новых и оригинальных результатов. Впервые найдены каналы реакции мономолекулярного разложения C_5H_4O , определены основные каналы продуктов для реакций C_5H_4O+H и C_5H_5+O , вероятные пути реакции $C_9H_7+O_2$ и для них получены константы скорости и коэффициенты ветвления. Для реакции C_9H_6O+H и безбарьерной реакции C_9H_7+O впервые определены реакционные пути, ведущие к разрушению

пятичленного кольца. Показано, что при температурах горения основными продуктами реакции C_9H_6O+N будут о-винилфенил/стиренил C_8H_7 .

Достоверность результатов работы не вызывает сомнений. Она обеспечена применением современных методов исследования и широкой апробацией результатов исследований. Основные результаты докладывались на российских и международных конференциях и опубликованы 13 научных публикациях, в том числе 7 статей в изданиях, рекомендованных ВАК России, а также 5 работ в сборниках трудов и тезисов докладов конференций. Исследование проведено на современном уровне. Содержание автореферата соответствует содержанию диссертации.

Диссертация Гильдиной А.Р. обладает достаточной степенью актуальности, новизны и научно-практической значимости и является законченной научно-квалифицированной работой. Диссертация соответствует «Требованиям о порядке присуждения ученых степеней», предъявляемым к кандидатским диссертациям, а автор исследования Гильдина Анна Руслановна, заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Ведущий научный сотрудник,

ФГБУН Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук

д.ф.-м.н.

Губернов Владимир Владимирович

125.10.19

эл. почта: gubernov@lpi.ru, тел.: +7(499) 132-67-43,

Я, Губернов Владимир Владимирович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Ученый секретарь

ФГБУН Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук

к.ф.-м.н.

Колобов Андрей Владимирович

Подпись Губернова В.В. подтверждаю.

ФГБУН Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук

Адрес: 119991 ГСП-1 Москва, Ленинский проспект, д.53, ФИАН

Телефоны: 8(499)132-65-54, 8(499)135-14-29

Факс: 8(499)135-78-80

e-mail: office@lebedev.ru