

## ОТЗЫВ

научного руководителя д.ф.-м.н., профессора кафедры физики Аязова Валерия Николаевича  
о работе Гильдиной Анны Руслановны над диссертацией

«Кинетические константы процессов окисления циклопентадиенила 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

Гильдина Анна Руслановна, 1991 года рождения, в 2015 году окончила радиотехнический факультет федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королева (национальный исследовательский университет)» по специальности 200202 «Лазерные системы в ракетной технике и космонавтике». С 2015 года по 2019 год обучалась в очной аспирантуре федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева» (Самарский университет). Будучи аспирантом первого курса Гильдина А.Р. с 2015 года начала работать в Самарском филиале Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук в лаборатории химических электроразрядных лазеров в должности инженера.

Диссертация Гильдиной А.Р. посвящена расчету кинетических констант и коэффициентов ветвления процессов окисления циклопентадиенила и инденила для условий горения углеводородных топлив. Достоверная информация о детальных механизмах и константах скоростей для реакций окисления бензольных колец, рассматриваемых в данной диссертации по большей части отсутствовало. Актуальность научной работы Гильдиной А.Р. обусловлена необходимостью разработок и создания достоверных кинетических моделей процессов горения в углеводородных пламенах. В работе был произведен квантово-механический расчет путей реакций инденила с атомарным и молекулярным водородом, циклопентадиенона с атомарным водородом и циклопентадиенила с атомарным кислородом, а также расчет путей реакции для 1-Н-инден-1-она с атомарным водородом. Для всех вышеобозначенных путей реакции были рассчитаны константы скорости, зависящие от давления и температуры, а также коэффициенты ветвления полученных продуктов реакции. Были сделаны выводы о наиболее выгодных путях формирования продуктов и дано заключение о скорости прохождения реакций в типичных условиях горения.

На основе уже предложенных ранее квантово-механических методов расчета и использования программных комплексов Gaussian 09 и MOLPRO 2010 Гильдина А.Р. провела расчет значений относительных энергий для изомеров, переходных состояний и продуктов реакции, энергии нулевых колебаний и колебательных частот соответствующих соединений, формирующихся на каждом этапе вышеуказанных реакций. Данные параметры были в дальнейшем использованы в программе MESS для расчета суммарных и индивидуальных констант скорости реакций, зависящих от температуры при различных значениях давления. Затем были сделаны выводы о коэффициентах ветвления реакций. Результаты этих исследований весьма значительны для существующих моделей горения, поскольку более подробно раскрывают механизм реакций окисления бензольных колец, что может в дальнейшем привести к созданию технологии, способствующей деградации полициклических ароматических соединений в камерах сгорания

По результатам исследований опубликованы 13 научных работ, в том числе 4 статьи в изданиях, рекомендованных ВАК России и 3 статьи, индексируемые базами Web Of Science и Scopus. Все работы проходили апробации на всероссийских и международных научных конференциях, симпозиумах и конкурсах.

Диссертация Гильдиной А.Р. отвечает всем требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Содержание диссертации достаточно точно отражено в



Диссертация является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение ряда задач для развития физической химии и расширения знаний о квантово-механической природе реакций окисления бензольных колец. Проверка работы на антиплагиат показала 91,01 % оригинальности.

Профессор кафедры физики  
ФГАОУ ВО «Самарский национальный  
исследовательский университет  
имени академика С.П. Королева»,  
главный научный сотрудник НОЦ ФНОС-73,  
доктор физико-математических наук,  
почта [azyazov@rambler.ru](mailto:azyazov@rambler.ru), телефон  
89270221957



В.Н. Аяззов

Подпись <u>Аяззова В.Н.</u> удостоверяю
<u>Кузьмичев В.С.</u> секретарь Самарского университета
<u>Кузьмичев В.С.</u>
_____ 20__ г.

