

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Красноухова В.С.

«Кинетика и механизмы реакций $\text{CH}+\text{SiH}_4/\text{GeH}_4$, $\text{C}_7\text{H}_7+\text{C}_3\text{H}_3/\text{C}_7\text{H}_7$, $\text{C}_5\text{H}_5+\text{CH}_3/\text{C}_9\text{H}_7$ в экстремальных условиях»,

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

В диссертационной работе Владислава Сергеевича Красноухова обсуждаются механизмы реакций $\text{CH}+\text{SiH}_4/\text{GeH}_4$, $\text{C}_7\text{H}_7+\text{C}_3\text{H}_3/\text{C}_7\text{H}_7$, $\text{C}_5\text{H}_5+\text{CH}_3/\text{C}_9\text{H}_7$, для чего были проведены теоретические расчеты соответствующих областей поверхностей потенциальной энергии и далее полученные данные использованы для расчетов с помощью кинетических теорий (РРKM+мастер-уравнения). Выбранная тема диссертационной работы соответствует специальности 1.3.17 «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» и является актуальной. Выводы диссертации достаточно обоснованы и не вызывают сомнения. Полученные В.С. Красноуховым результаты могут найти применение при создании кинетических баз данных, описывающих механизмы горения и астрохимические процессы. Результаты научной работы соискателя опубликованы в 12 статьях в авторитетных в области международных журналах (например, Nature Comm. и JPC(A)), индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus, а также в отечественных изданиях, рекомендованных ВАК. Работа апробирована на многих всероссийских и международных конференциях.

Среди основных замечаний к автореферату диссертации В.С. Красноухова хотелось бы отметить следующие:

1. Для многих интермедиатов и переходных состояний (особенно, для реакций CH с силаном и германом) возможен заметный вклад регионов ППЭ с многоконфигурационным характером волновой функции, в то время как везде в работе используются single-reference методы. Автору следовало бы привести типичные значения T1- или %TAE- диагностики, в особенности, для систем из второй главы.
2. В описании третьей главы упоминается использование теории фазового пространства для безбарьерных реакций. Из автореферата трудно понять, как были подобраны значения потенциала дисперсионного взаимодействия, используемого в этой теории. Возможно, эти сведения есть в полном тексте диссертации.
3. При изложении разных глав следует использовать универсальную систему энергетических единиц (ккал/моль либо кДж/моль).

Высказанные замечания являются частными и не влияют на общее положительное впечатление от работы. Диссертация Владислава Сергеевича Красноухова «Кинетика и механизмы реакций $\text{CH}+\text{SiH}_4/\text{GeH}_4$, $\text{C}_7\text{H}_7+\text{C}_3\text{H}_3/\text{C}_7\text{H}_7$, $\text{C}_5\text{H}_5+\text{CH}_3/\text{C}_9\text{H}_7$ в экстремальных условиях» отвечает п. 9 Положения о присуждения ученых степеней (Постановление Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г.), а ее автор, В.С. Красноухов, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17. «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

Даю свое согласие на обработку персональных данных.

Кандидат физико-математических наук (01.04.17 «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества»).

И. о. заведующего кафедрой химической и биологической физики, физический факультет, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский Национальный Исследовательский Государственный Университет»,

Адрес служебный: 630090, г. Новосибирск, ул. Пирогова, 1; тел.: (383)333-33-48; vitaly.kiselev@kinetics.nsc.ru

С.н.с. лаб. квантовой химии и компьютерного моделирования, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук (ИХКГ СО РАН).

Адрес служебный: 630090, г. Новосибирск, Институтская ул., 3; тел.: (383)333-33-48; vitaly.kiselev@kinetics.nsc.ru

Киселев Виталий Георгиевич

Дата: «2» октября 2023 г.

Подпись Киселев В.Г. заверяю
Фамилия

Начальник
отдела кадров ОТДЕЛ
А.Н. Поддубная КАДРОВ

