

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Красноухова Владислава Сергеевича

«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»,

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

Диссертационная работа Красноухова В.С. посвящена исследованию химических реакций элементов подгруппы углерода и водорода. Механизмы и скорости протекания реакций углеводородов до сих пор остаются плохо изученными, особенно в экстремальных условиях (высокие температуры, и высокие давления в условиях горения или сверхнизкие температуры и давления в условиях межзвёздной среды). Экспериментальные исследования реакций роста полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) затруднительны в связи со сложностями воспроизведения условий их протекания. Однако существенный прогресс в развитии квантомеханических расчётных методов позволяет исследователям раскрывать механизмы протекания сложных реакций и находить кинетические константы. Автор в своей работе использует неэмпирические квантово-механические расчётные методы высокого уровня и точности для определения кинетических констант реакций $\text{CH}+\text{SiH}_4/\text{GeH}_4$, $\text{C}_7\text{H}_7+\text{C}_3\text{H}_3/\text{C}_7\text{H}_7$, $\text{C}_5\text{H}_5+\text{CH}_3/\text{C}_9\text{H}_7$. Учитывая вышеизложенное, рецензируемая работа, несомненно, актуальна.

Научную новизну работы подтверждают результаты исследований, изложенные в автореферате:

- Впервые исследован механизм реакции метин радикала с тетрагидридами германия и кремния в условиях однократных столкновений. Определены основные бимолекулярные продукты реакции и их относительные выходы.
- Разработана модель реакции бензила (C_7H_7) с пропаргилом (C_3H_3).
- Выявлен механизм реакции циклопентадиенила (C_5H_5) и метила (CH_3).
- Предложен новый механизм роста полициклических ароматических углеводородов в реакции $\text{C}_5\text{H}_5+\text{C}_9\text{H}_7$.

Теоретическая и практическая ценность работы

Результаты исследований автора могут быть использованы для пополнения баз данных кинетических констант реакций в экстремальных условиях. В целом, механизмы химических реакций и их константы скоростей востребованы в химической физике, при проектировании камер сгорания энергетических установок и в астрофизических моделях, описывающих эволюцию органических соединений в космической среде.

Замечание по автореферату диссертации:

Достоверность полученных результатов наряду с апробированными кванто-механическими методами расчётов, которые не вызывают сомнений, определялась удовлетворительным согласием с уже известными теоретическими и экспериментальными данными. Однако в автореферате нигде нет прямого сопоставления известных результатов и полученных автором. Поэтому трудно понять, насколько удовлетворительно это согласие. Возможно это сопоставление есть в основном тексте диссертации.

Указанное замечание, тем не менее, не снижает ценность представленных в автореферате диссертации результатов исследований.

Оценка диссертации в целом. Из представленного на отзыв автореферата можно сделать вывод, что диссертационная работа выполнена на высоком научном уровне и является законченным трудом. Достоверность полученных результатов обоснована. Материал автореферата изложен ясно и хорошо иллюстрирован. Результаты работы апробированы на многочисленных российских и международных конференциях, представлены в научной печати, в том числе 12 статей опубликованы в изданиях, индексируемых базой Scopus, Web of Science, и в журналах, рекомендованных ВАК РФ для опубликования материалов кандидатских и докторских диссертаций.

Работа Красноухова В.С. удовлетворяет всем требованиям ВАК РФ, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а ее автор, заслуживает присуждения искомой степени по специальности 1.3.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремального состояния вещества.

Доктор технических наук,
профессор кафедры «Ракетно-космическая техника и энергетические системы» ФГАОУ ВО «Пермский национальный исследовательский политехнический университет»

Малинин Владимир Игнатьевич

614990, г. Пермь, Комсомольский проспект, д.29.

тел.: 7-912-48-99-650

malininvi@mail.ru



Подпись *Малинина В.И.*
Зам. начальника УК
Н.В. Колчина