

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»

Работа Красноухова В.С. направлена на детальное исследование реакций: $\text{CH}+\text{SiH}_4/\text{GeH}_4$, $\text{C}_7\text{H}_7+\text{C}_3\text{H}_3/\text{C}_7\text{H}_7$, $\text{C}_5\text{H}_5+\text{CH}_3/\text{C}_9\text{H}_7$. Исследование сфокусировано на составление подробной картины протекания этих реакций, то есть на описание всех путей ветвления с количественными оценками констант скоростей при разных условиях (температура, давление). Для решения задачи используются максимально точные квантово-механические расчётные методы, позволяющие учесть все промежуточные и переходные состояния, а также кинетические уравнения теории Райса-Рамспергера-Касселя-Маркуса (РРКМ), дающие возможность оценить кинетические параметры реакций. Выбор применяемых методов обоснован и является наилучшим для решения таких задач, что подтверждается точностью результатов, показанной автором.

Исследуемые реакции представляют важное значение для развития теории горения, а полученные параметры этих реакций могут быть использованы как на фундаментальном уровне в широком диапазоне научных направлений, так и для практического применения. Реакции с одно- и двухкольцевыми полициклическими ароматическими углеводородами (ПАУ) могут быть внедрены в модели роста ПАУ, разрабатываемые для описания горения в земных условиях и космических, в частности, в условиях оболочек звёзд асимптотической ветви гигантов богатых углеродом, которые служат основным источником молекул ПАУ и других углеродных частиц (фуллерены, аморфный углерод и другие). Несмотря на множество теоретических и экспериментальных работ, посвящённых теории горения, детали механизма роста ПАУ фактически остаются неопределёнными. Точные квантово-механические расчёты потенциально важных реакций, ведущих к росту ПАУ, необходимы для построения целостной и детальной картины этого процесса в теориях химической физики. Поскольку ПАУ являются канцерогенами, то изучение факторов, влияющих на их рост, может иметь колоссальное значение для улучшения качества жизни человечества в целом. Практическое значение для развития современных технологий могут иметь результаты исследования реакций взаимодействия углеводородов с силаном и германом. На сегодняшний день уже найдено множество применений этих соединений, в частности, в микроэлектронике, и изучение их реакционной активности может расширить и оптимизировать варианты использования. Таким образом, проведённая Красноуховым В.С. работа является актуальной как для развития фундаментальной науки, так и для промышленности и экологии.

Результаты, полученные Красноуховым В.С., являются уникальными и новыми:

- 1) Впервые исследованы механизмы реакций силана и германа с метин-радикалом. Получена информация об относительных выходах продуктов и общей реакционной способности данных молекул;
- 2) Описана модель образования ароматических соединений с одним и двумя бензольными кольцами в реакции радикалов бензила и пропаргила в условиях горения и околозвёздных оболочек;
- 3) Показана общая модель реакции метила с циклопентадиенилом, описывающая пути образования промежуточных и конечных продуктов;
- 4) Предложен новый механизм образования ПАУ с тремя бензольными кольцами через реакцию между циклопентадиенилом и инденилом в условиях горения, включающий в себя различные пути наиболее выгодных изомеризаций.

Полученные Красноуховым В.С. результаты исследований реакций, такие как структуры, энергии и колебательные частоты, коэффициенты ветвления реагентов продуктов, промежуточных и переходных состояний пополняют существующие базы данных кинетических констант реакций, что непосредственно представляет как теоретическую, так и практическую значимость исследования. С астрономической точки зрения наиболее важными являются реакции образования и роста ПАУ, так как астрохимические модели, включающие имеющуюся на сегодняшний день сетку соответствующих реакций, не дают согласия с наблюдаемым количеством ПАУ в межзвёздной среде и требуют пополнения и уточнения сетки реакций образования и роста ПАУ.

В результате работы сформулировано четыре основных вывода, которые подтверждают выполнение поставленных задач работы.

На момент опубликования автореферата результаты автора были апробированы в 9 статьях, цитируемых в рекомендуемых ВАК международных и российских базах данных, и 14 тезисах конференций, что более, чем достаточно, для защиты кандидатской диссертации.

Текст автореферат составлен согласно необходимым требованиям и содержит все обязательные пункты. Среди замечаний к автореферату диссертации Красноухова В.С. можно отметить наличие в тексте нескольких грамматически некорректных выражений:

- «разработка механизма» вместо «исследование» или «выявление механизма», поскольку автор не разрабатывает механизм, а исследует механизм протекания реакций;
- «...при температурах ниже 1100 К время, необходимое для достижения стационарных условий, чрезмерно...» - после слова «чрезмерно» отсутствует качественная оценка времени, к которой относится наречие «чрезмерно» (например, «чрезмерно большое»);
- «Новый механизм реакции циклопентадиенил (C_5H_5) и инденил (C_9H_7) радикалов показал,...» - механизм не способен показывать что-либо.

Отмечу, что в тексте дважды вводится сокращение для теории «РРКМ», но при этом многократно используется несокращённое название. Также введено, но не используется сокращение «АВГ» (асимптотическая ветвь гигантов). Перечисленные

замечания, конечно же, не умоляют важность проделанной работы и достигнутых результатов в диссертации Красноухова В.С.

Считаю, что диссертационная работа Красноухова В.С. на тему «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» соответствует специальности 1.3.17. «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» и отвечает критериям п.9-11 и п. 13, 14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 г.

Красноухов Владислав Сергеевич несомненно 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 и включение в аттестационное дело персональных данных.

Кандидат физико-математических наук (01.03.02 – астрофизика и звездная астрономия), старший научный сотрудник отдела физики и эволюции звезд



Мурга Мария Сергеевна

Дата: « 4 » сентября 2023 г.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт астрономии Российской академии наук (ИНАСАН)

Адрес: Россия, г. Москва, ул. Пятницкая, 48, 119017

Тел.: +7(963)7894944

E-mail: murga@inasan.ru

Подпись заверяю

Заместитель директора по научной работе

Сичевский Сергей Григорьевич

