

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»

Диссертационная работа Красноухова В.С. посвящена изучению реакций  $\text{CH} + \text{SiH}_4/\text{GeH}_4$ ,  $\text{C}_7\text{H}_7 + \text{C}_3\text{H}_3/\text{C}_7\text{H}_7$ ,  $\text{C}_5\text{H}_5 + \text{CH}_3/\text{C}_9\text{H}_7$ . Основное внимание исследования уделено расчету кинетики и описанию путей ветвления на основе полученных при расчетах характеристик поверхностей потенциальных энергий и геометрических параметров изомеров при использовании теории Райса-Рамспергера-Касселя-Маркуса. В работе были рассмотрены наиболее актуальные исследования взаимодействий основных углеводородных и ароматических соединений начиная от простейшего углеводородного радикала метилидина, который может взаимодействовать гидридами углеродов для дальнейшего роста, и заканчивая инденилом, который является предшественником образования простейших полициклических ароматических углеводородов (ПАУ). Изучение реакций гидридов кремния и германия с метилидином является перспективным направлением для понимания процессов трансформации изовалентных систем в экстремальных условиях. Помимо этого, рассмотрены задачи роста углеводородных комплексов, основанных на взаимодействии двух ароматических радикалов. В исследованиях ПАУ, как правило, уделяется большой интерес взаимодействию пяти- и шестичленных углеродных колец, так как это ведет к их росту и формированию сажи. Отсутствие констант скорости и коэффициентов ветвления продуктов, а также сложность экспериментов для таких реакций препятствовали созданию достоверных кинетических моделей горения. В связи с этим не вызывает сомнения актуальность диссертационной работы Красноухова В.С., посвященной задаче исследования механизмов образования сложных ПАУ и их предшественников.

Полученные Красноуховым В.С. данные, такие как константы скорости реакций, коэффициенты ветвлений продуктов, энергетические и геометрические параметры, полученные при выполнении текущих научных исследований, пополняют кинетические базы данных, а потому работа является как теоретически, так и практически значимой для химической физики в экстремальных условиях. На момент публикации автор имеет 9 апробированных статей цитируемых в Scopus, WoS и ВАК, а также 14 тезисов конференций, что подтверждает достоверность результатов



диссертационной работы Красноухова В.С. По результатам работы было сформулированы выводы, которые подтверждают выполнение поставленных задач работы и доказывают достижение цели исследования.

По материалам автореферата можно сделать несколько замечаний.

1. При рассмотрении реакций  $\text{CH}$  с  $\text{SiH}_4$  и  $\text{GeH}_4$  (стр. 9, 10) следовало бы рассмотреть дополнительно возможность трансформации продуктов  $p_3$  и  $p_2$  в  $p_1$  с помощью внутримолекулярных перегруппировок.

2. На с. 13 имеется неудачно построенный фрагмент текста, не объясняющий полученный вывод: *"Триплетное промежуточное состояние тетрагидроантрацена с относительной энергией -10 кДж/моль образуется из реагентов с преодолением триплетного барьера в 71 кДж/моль. Далее реакционный путь ведет к синглетному изомеру, затрачивая энергию в 112 кДж/моль. Таким образом, найденный триплетный участок реакционного пути будет увеличивать выход антрацена."* Следовало бы описать этот вариант преобразования более четко.

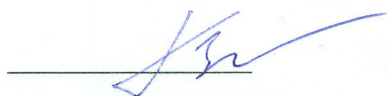
3. На с. 15 имеется неудачная фраза *"в основном образуется бензофульвален (95-99%) из-за учета энтропийного фактора пути образования этого продукта."* Следовало бы написать *"из-за влияния"*.

Тем не менее, эти замечания не снижают значимость и качество представленной работы.

Диссертационная работа Красноухова В.С. является законченным и полноценным научным исследованием. Результаты являются новыми, достоверными и определенно вносят важный вклад в развитие химической физики и науки в целом. Диссертация соответствует критериям, установленным пунктами 9-11 к кандидатским диссертациями «Положения о порядке присуждения ученых степеней». Автор Красноухов Владислав Сергеевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17. Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Даем согласие на обработку персональных данных.

Ведущий научный сотрудник лаборатории твердотельных электрохимических систем Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, доктор химических наук (1.4.4. (02.00.04) Физическая химия)



Зюбина Татьяна Сергеевна

Ведущий научный сотрудник лаборатории твердотельных электрохимических систем Федерального исследовательского центра

проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, доктор химических наук (1.4.4. (02.00.04) Физическая химия)



Зюбин Александр Сергеевич

Дата: « 18 » сентября (2023 г.

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук

Адрес: Россия, Московская обл., г. Черноголовка, пр. академика Семенова, д. 1, 142432

Тел.: +7(49652)2-75-11, E-mail: zyubin@icp.ac.ru

Подписи Зюбиной Татьяны Сергеевны и Зюбина Александра Сергеевича заверяю,

главный ученый секретарь Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, доктор химических наук

МП



Психа Борис Львович