

«УТВЕРЖДАЮ»

Директор Самарского филиала  
Федерального государственного  
бюджетного учреждения науки  
Физического института  
им П. Н. Лебедева  
Российской академии наук



В. Н. Аяззов

2023 г.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Самарского филиала Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института им П. Н. Лебедева Российской академии наук (СФ ФИАН)

Диссертация 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» по специальности 1.3.17. – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества выполнена в Самарском филиале Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института им. П. Н. Лебедева Российской академии наук (СФ ФИАН) и федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева» (Самарский университет).

Соискатель, Красноухов Владислав Сергеевич, 1994 года рождения, в 2017 году получил степень магистра по направлению 03.04.01 «Прикладные математика и физика» в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева». В период подготовки диссертации с 2018 по 2022 год являлся аспирантом кафедры физики федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева», где работал лаборантом-исследователем в научно-исследовательской лаборатории «Физики и химии горения». С 2022 года по настоящее время работает высококвалифицированным младшим научным сотрудником в лаборатории физико-химической кинетики Самарского филиала Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института им. П. Н. Лебедева Российской академии наук.

Научный руководитель доктор физико-математических наук, Загидуллин Марсель Вакифович, является высококвалифицированным главным научным сотрудником лаборатории физико-химической кинетики Самарского филиала Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института им. П. Н. Лебедева Российской академии наук и, по совместительству, профессором кафедры физики в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева».

По результатам рассмотрения 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», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17. – Химическая физика, горение и взрыв,

физика экстремальных состояний вещества, на заседании Ученого Совета СФ ФИАН, (протокол № 5 от 29.03.2023г.) принято следующее заключение.

### 1. Оценка выполненной соискателем работы

Диссертационная работа является *завершенной*.

Тема диссертационной работы признана *актуальной*. Это обусловлено тем, что реакции образования полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) и сажи являются популярными и важными темами для исследования окружающей среды. Во многих лабораториях мира проводятся исследования механизмов и кинетики реакций роста ПАУ, таких как бензол, бензил и инденил в более крупные ПАУ, нацеленные на получение детальной информации о механизмах реакций, энергетике реакционных каналов, кинетических константах, которые ранее не были получены или были неполными, что сильно усложняло понимание кинетики ПАУ и сажи в горении. Также исследования реакций взаимодействия простейших углеводородных радикалов с силаном и германом позволит более глубоко узнать о реакционных способностях полуметаллов, что является неотъемлемым плюсом в будущих достижениях микроэлектроники.

В диссертационной работе решались следующие задачи:

1. Определение реакционных путей и коэффициентов ветвлений продуктов для взаимодействий метин радикала (СН) с силаном (SiH<sub>4</sub>) и германом (GeH<sub>4</sub>).

2. Разработка механизмов образования моноциклических и двуциклических соединений (метиленинданилы, метилениндены и нафталин) при взаимодействии бензила (С<sub>7</sub>H<sub>7</sub>) и пропаргила (С<sub>3</sub>H<sub>3</sub>). Нахождение зависящих от температур и давлений кинетических констант.

3. Определение относительного выхода бензола в реакции циклопентадиенила (С<sub>5</sub>H<sub>5</sub>) и метила (СН<sub>3</sub>) при типичных условиях горения.

4. Раскрытие механизма реакции циклопентадиенила (С<sub>5</sub>H<sub>5</sub>) и инденила (С<sub>9</sub>H<sub>7</sub>), а также вычисление результирующих констант скоростей для реакционных каналов, ведущих к образованию трехкольцевых продуктов.

2. **Достоверность** полученных автором результатов расчетов геометрий и относительных энергий реагентов, промежуточных и переходных комплексов, а также продуктов подтверждается применением апробированных многими исследователями квантово-механических теоретических методов и моделей, а также сравнением с известными теоретическими результатами и их совпадением при учете аналогичных термодинамических условий.

3. **Диссертация соответствует** п.1 «Атомно-молекулярная структура химических частиц и веществ, механизмы химического превращения, молекулярная, энергетическая, химическая и спиновая динамика элементарных процессов, физика и физические теории химических реакций и экспериментальные методы исследования химической структуры и динамики химических превращений», п.5 «Поверхности потенциальной энергии химических реакций и квантовые методы их расчета; динамика движения реагентов на потенциальной поверхности; методы динамических траекторий и статические теории реакций; туннельные эффекты в химической динамике; превращение энергии в элементарных процессах и химические лазеры; химические механизмы реакций и управление реакционной способностью; когерентные процессы в химии, когерентная химия – квантовая и классическая; спиновая динамика и спиновая химия; фемтохимия; спектроскопия и химия одиночных молекул и кластеров; экспериментальные методы исследования химической, энергетической и спиновой динамики», п.6 «Строение, структура и реакционная способность интермедиатов химических реакций; химические механизмы и физика каталитических процессов; динамика, структура и спектроскопия каталитически активных поверхностей» областей исследования паспорта **специальности** 1.3.17. – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

4. В рамках диссертационной работы получены результаты, обладающие **научной новизной и выносимые на защиту**:

1. Впервые исследован механизм реакции метин радикала с тетрагидридами германия и кремния в условиях однократных столкновений. Найдены геометрические и энергетические характеристики промежуточных и переходных состояний на диаграмме



поверхности потенциальной энергии (ППЭ) реакции. Определены основные бимолекулярные продукты реакции и их относительные выходы.

2. Разработана модель реакции бензила ( $C_7H_7$ ) с пропаргилом ( $C_3H_3$ ). Определены реакционные каналы, ведущие к образованию основных моноциклических и двуциклических продуктов в экстремальных условиях.

3. Выявлен механизм реакции циклопентадиенила ( $C_5H_5$ ) и метила ( $CH_3$ ). Вычислены относительные энергии молекулярных структур и построена диаграмма ППЭ, включающая в себя различные реакционные пути образования бензола и фульвена.

4. Предложен новый механизм роста ПАУ в реакции  $C_5H_5 + C_9H_7$ . Вычислены константы скорости и рассчитаны процентные выходы продуктов. Определены наиболее вероятные реакционные каналы образования трехкольцевых ПАУ при температурах горения.

#### 5. Полнота изложения результатов работы в публикациях.

Научные положения, выводы и рекомендации, сформулированные в диссертации, базируются на расчетных теоретических исследованиях автора. Все выносимые на защиту результаты диссертации Красноухова В.С. получены лично автором. Соискатель имеет 26 опубликованных научных работ, в том числе 4 статьи в изданиях, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией России, 9 статей в ведущих рецензируемых журналах, индексируемых в международных базах данных Scopus и Web of Science и 13 работ в сборниках трудов и тезисов докладов международных, всероссийских и региональных конференций. Опубликованные работы достаточно полно отражают содержащиеся в диссертации научные результаты, а также основные аспекты их практического применения. В совместных работах Красноухову В.С. принадлежит проведение квантово-механических расчетов, анализ и обработка результатов, а также их интерпретация.

Основные научные результаты Красноухова В.С. отражены в следующих публикациях ведущих российских и международных изданиях:

##### WoS/Scopus:

1. Kaiser, R.I. Unconventional excited-state dynamics in the concerted benzyl ( $C_7H_7$ ) radical self-reaction to anthracene ( $C_{14}H_{10}$ ) / R.I. Kaiser, L. Zhao, W. Lu, M. Ahmed, V.S. Krasnoukhov, V.N. Azyazov, A.M. Mebel // Nature communications. – 2022. – Т. 13. – №. 1. – С. 1-8.

2. Krasnoukhov, V. S. Combined Crossed Molecular Beams and Ab Initio Study of the Bimolecular Reaction of Ground State Atomic Silicon ( $Si$ ;  $^3P$ ) with Germane ( $GeH_4$ ;  $X^1A_1$ ) / V.S. Krasnoukhov, V.N. Azyazov, A.M. Mebel, S. Doddipatla, Z. Yang, S. Goettl, R.I. Kaiser // ChemPhysChem. – 2021. – Т. 22. – №. 14. – С. 1497-1504.

3. Yang, Z. Directed Gas Phase Formation of the Elusive Silylgermylidyne Radical ( $H_3SiGe$ ,  $X^2A''$ ) / Z. Yang, S. Doddipatla, R.I. Kaiser, V.S. Krasnoukhov, V.N. Azyazov, A.M. Mebel // ChemPhysChem. – 2021. – Т. 22. – №. 2. – С. 184-191.

4. Krasnoukhov, V.S. Formation of Phenanthrene via Recombination of Indenyl and Cyclopentadienyl Radicals: A Theoretical Study / V. S. Krasnoukhov, M. V. Zagidullin, I. P. Zavershinskiy, A. M. Mebel // Journal of Physical Chemistry A. — 2020. — Т.124 — № 48. — С. 9933-9941.

5. Krasnoukhov, V. S. The study of indenyl + cyclopentadienyl reaction / V. S. Krasnoukhov, D. P. Porfiriev, M. V. Zagidullin, A. M. Mebel // AIP Conference Proceedings. — 2020. — Т. 2304. – №1. – С. 020012.

6. Yang, Z. Gas Phase Formation of Methylgermylene ( $HGeCH_3$ ) / Z. Yang, C. He, S. Doddipatla, V.S. Krasnoukhov, V.N. Azyazov, A.M. Mebel, R.I. Kaiser // ChemPhysChem – 2020 – Т. 21 – №17 – С. 1898-1904.



7. Yang, Z. Directed Gas Phase Formation of Silene ( $H_2SiCH_2$ ) / Z. Yang, S. Doddipatla, C. He, V.S. Krasnoukhov, V.N. Azyazov, A.M. Mebel, R.I. Kaiser // Chem. - Eur. J. – 2020 – Т. 26 – №60. – С. 13584-13589.

8. Krasnoukhov, V.S. Kinetics of the  $CH_3 + C_5H_5$  Reaction: A Theoretical Study / V.S. Krasnoukhov, D.P. Porfiriev, I.P. Zavershinskiy, V.N. Azyazov, A.M. Mebel // J. Phys. Chem. A. – 2017 – Т. 121 – №48 – С. 9191–9200.

9. Krasnoukhov, V. S. Reaction of cyclopentadienyl and methyl radicals / V. S. Krasnoukhov, A. M. Mebel, I. P. Zavershinskiy, V. N. Azyazov // Journal of Biomedical Photonics & Engineering. – 2017. – Т. 3. – No 2. – С. 020304.

**ВАК:**

10. Красноухов, В. С. Механизм образования четырехкольцевых полициклических ароматических углеводородов при саморекombинации инденила / В. С. Красноухов, М. В. Загидуллин, В. Н. Азязов, А. М. Мебель, // Физика горения и взрыва. – 2023. – Т. 59. – № 2. – С. 31-39.

11. Красноухов, В. С. Формирование двухкольцевых полициклических ароматических углеводородов при рекомбинации бензил и пропаргил радикалов в условиях околозвездных оболочек звезд асимптотической ветви гигантов / В. С. Красноухов, П. С. Пивоваров, М. В. Загидуллин, В. Н. Азязов, А. М. Мебель, А. Н. Морозов // Астрономический журнал. – 2022. – Т. 99. – № 9. – С. 767-783.

12. Красноухов, В. С. Экстремумы на поверхности потенциальной энергии реакции циклопентадиенил и инденил радикалов / В. С. Красноухов, А. Р. Гильдина, В. Н. Азязов, А. М. Мебель // Физическое образование в вузах. – 2019. – Т. 25. – №. S2. – С. 231-234.

13. Гильдина, А. Р. Константы скорости для реакции 1-Н-инден-1она+ Н / А. Р. Гильдина, В. С. Красноухов, А. М. Мебель, В. Н. Азязов // Физическое образование в вузах. – 2019. – Т. 25. – №. S2. – С. 32-35.

6. **Апробация работы** проводилась на следующих научных семинарах СФ ФИАН, также международных и всероссийских конференциях и семинарах:

- Международная конференция по физике и химии горения и процессам в экстремальных средах (Самарский университет, Самара, 2022г.);
- Всероссийский молодежный Самарский конкурс-конференция научных работ по оптике и лазерной физике (СФ ФИАН, Самара, 2016-2021гг.);
- 64-я Всероссийская научная конференция МФТИ (МФТИ, Москва, 2021г.);
- XI Всероссийская конференция с международным участием «Горение Топлива: Теория, Эксперимент, Приложения» (ИТ СО РАН, Новосибирск, 2021г.);
- XXVIII Международная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов» (МГУ, Москва, 2019-2021гг.);
- LXXI молодежная научная конференция, посвященная 60-летию полёта в космос Ю.А. Гагарина (Самарский университет, Самара, 2021г.).

7. **Теоретическая и практическая ценность проведенных исследований** заключается в том, что полученные результаты будут использованы для пополнения баз данных кинетических констант реакций горения и будут востребованы разработчиками камер сгорания энергетических установок, которые работают на углеводородном горючем. Подробные механизмы реакций, вычисленные константы скоростей и полученные процентные выходы на продукты будут высоко востребованы в химической физике, разработчиками камер сгорания энергетических установок и в астрофизике в моделях описывающих эволюцию органических соединений на различных космических объектах.

В диссертации отсутствует заимствованный материал без ссылки на автора и/или источник заимствования, а также отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных

соискателем ученой степени работ, в которых изложены основные научные результаты диссертации.

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» четко структурирована, написана понятным и грамотным языком, хорошо оформлена, является завершенной научно-квалификационной работой, в которой содержится решения ряда задач, имеющих существенное значение для развития кинетических моделей горения. Рекомендуются представить диссертацию к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17. – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Заключение принято на заседании Ученого Совета Самарского филиала Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук.

Присутствовали на заседании 9 членов Ученого совета СФ ФИАН. Результаты голосования: «за» – 9 чел., «против» – 0 чел., протокол № 5 от 29.03.2023г.

И. о. учёного секретаря СФ ФИАН, к.ф.-м.н.



А.М. Майорова