

# О Т З Ы В

научного руководителя старшего научного сотрудника, д. ф.-м. н. Загидуллина Марселя Вакифовича  
о диссертационной работе Красноухова Владислава Сергеевича на тему:  
«Кинетика и механизмы реакций  $\text{C}_7\text{H}_7 + \text{SiH}_4/\text{GeH}_4$ ,  $\text{C}_7\text{H}_7 + \text{C}_3\text{N}_3/\text{C}_7\text{H}_7$ ,  $\text{C}_5\text{H}_5 + \text{CH}_3/\text{C}_9\text{H}_7$   
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

Красноухов Владислав Сергеевич, 1994 года рождения, в 2017 году окончил факультет информатики с присуждением степени магистра федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени С.П. Королева» по направлению подготовки 03.04.01 Прикладные математика и физика». С 2018 по 2022 год обучался очно в аспирантуре федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени С.П. Королева». В период с 2022 по 2024 год работал высококвалифицированным младшим научным сотрудником лаборатории физико-химической кинетики СФ ФИАН. С 2024 года по настоящее время работает в центре лабораторной астрофизики СФ ФИАН.

Научно-квалификационная работа (диссертация) аспиранта Красноухова Владислава Сергеевича посвящена изучению механизмов и кинетики реакций углеводородных соединений, участвующих в создании кремний- и германийорганических соединений, а также росте полициклических ароматических радикалов (ПАУ), которые при коагуляции могут формировать сажу в окружающей среде, что отрицательно влияет на её состояние и здоровье человека. Актуальность научной работы Красноухова В.С. обусловлена необходимостью разработок и создания, также уточнения достоверных кинетических моделей в экстремальных условиях.

Красноухов В.С. раскрыл механизмы взаимодействия углеводородного радикала  $\text{C}_7\text{H}_7$  с силаном  $\text{SiH}_4$  и германом  $\text{GeH}_4$ . Данные реакции были рассмотрены экспериментально научной группой профессора Кайзера Р.И. из Гавайского университета, а потому требовали теоретического обоснования результатов, которые показали, что при однократном столкновении метилидина с силаном наиболее стабильным будет являться силан, а при взаимодействии с германом – метилгермилен.

В работе также с использованием высокоуровневых методов квантовой механики были найдены геометрии реагентов, продуктов, промежуточных и переходных состояний, вычислены относительные энергии всех структур и построена поверхности потенциальной энергии реакций бензила  $\text{C}_7\text{H}_7$  с пропаргилом  $\text{C}_3\text{N}_3$  и саморекombинации бензила. Вычислены значения констант скоростей и коэффициентов ветвления продуктов данных реакций в широком диапазоне изменения давлений и температуры присущих как горению, так и условиям околозвездной оболочки асимптотической ветви гигантов. Результаты показали, что в экстремальных условиях наиболее выгодными продуктами реакции  $\text{C}_7\text{H}_7 + \text{C}_3\text{N}_3$  являются двуциклические метилениданилы.

Найдены реакционные пути, ведущие к моно- и полициклическим продуктам в процессе взаимодействия метила и инденила с циклопентадиенилом. Показано, что основными продуктом реакции  $\text{C}_5\text{H}_5 + \text{CH}_3$  являются изомеры фульвен и бензол, доли которых могут составлять при низком давлении в 0,01 атм ~76% для бензола, а для фульвена доходить до 90% при увеличении давления до 100 атм. В реакции  $\text{C}_5\text{H}_5 + \text{C}_9\text{H}_7$  было также показано, что начальные изомеры могут быстро терять атом Н, образуя бензофульвален, или изомеризоваться до фенантрена, антрацена или бензоазулена. Согласно расчетам, пути образования фенантрена требуют наименьших барьеров и предпочтительнее

при низких температурах  $<750\text{ K}$ , а при более типичных температурах горения ( $1000\text{-}2500\text{ K}$ ) разложение  $\text{C}_{14}\text{H}_{11}$  в основном ведет к образованию бензофульвалена.

По результатам исследований опубликованы 26 научных работ, в том числе 4 статей в изданиях, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией России. Все работы проходили апробации на всероссийских и международных научных конференциях. За период обучения в аспирантуре Красноухов В.С. признавался победителем всероссийского конкурса грантов РФФИ «Аспиранты» 2020 года, стипендии Президента Российской Федерации для студентов, обучающихся за рубежом, а также является участником гранта Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (№ 075-15-2021-597).

Диссертация является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение ряда задач расширения знаний о физике и химии горения. Считаю, что диссертация Красноухова В.С. отвечает всем требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, выполнена в полном объеме и результаты исследований достаточно точно отражены в опубликованных статьях, а 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.

Профессор кафедры физики  
ФГАОУ ВО «Самарский национальный  
исследовательский университет  
имени академика С.П. Королёва»,  
доктор физико-математических наук

28.08.2024

Загидуллин М.В.

С отзывом  
одобряющим

Красноухов В.С.  
В.С.  
28.08.2024

