

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 003.014.02 НА БАЗЕ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ
НАУКИ ИНСТИТУТА ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ И ГОРЕНИЯ
ИМ. В. В. ВОЕВОДСКОГО СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ
АКАДЕМИИ НАУК МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО
ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА
СОИСКАНИЕ УЧЁНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 03.03.2021, № 2

О присуждении Дмитриеву Артему Михайловичу, гражданину Российской Федерации, учёной степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация *«Кинетика горения модельных биотоплив на основе сложных этиловых эфиров»* в виде рукописи по специальности 01.04.17 – «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» принята к защите 24 декабря 2020 г., протокол № 11, диссертационным советом Д 003.014.02 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук (ИХКГ СО РАН), Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 630090, г. Новосибирск, ул. Институтская, д. 3, приказ о создании диссертационного совета № 1511/нк-от 25.11.2016 года.

Соискатель, *Дмитриев Артем Михайлович*, 1992 года рождения, на момент защиты диссертации работает в должности младшего научного сотрудника ИХКГ СО РАН. В 2015 году соискатель окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет». С 2012 года А.М. Дмитриев работает в ИХКГ СО РАН.

Диссертация выполнена в лаборатории кинетики процессов горения ИХКГ СО РАН.

Научный руководитель – кандидат физико-математических наук, *Князьков Денис Анатольевич*, старший научный сотрудник лаборатории кинетики процессов горения ИХКГ СО РАН.

Официальные оппоненты:

1. **Аязов Валерий Николаевич**, доктор физико-математических наук, доцент, директор Самарского филиала Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук»;

2. **Титова Наталья Сергеевна**, кандидат физико-математических наук, начальник отдела «Физика неравновесных процессов и физико-химическая кинетика» отделения 600 Федерального государственного унитарного предприятия «Центральный институт авиационного моторостроения имени П.И. Баранова»;

дали **положительные отзывы** на диссертацию.

Ведущая организация, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Объединённый институт высоких температур Российской академии наук» (ОИВТ РАН), в своём **положительном заключении**, подписанном доктором физико-математических наук, заведующим Лабораторией №19. – неравновесных процессов **Ереминым Александром Викторовичем**, утверждённом директором, доктором физико-математических наук, академиком РАН **Петровым Олегом Федоровичем**, указала, что данная диссертационная работа удовлетворяет требованиям п. 9 Положения «О порядке присуждения учёных степеней», утверждённом Постановлением правительства РФ от 24.09.2013 № 842, а её автор, Дмитриев А.М., заслуживает присвоения ему искомой учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

В положительном заключении ведущей организации имеются следующие замечания (1) об отсутствии модификаций констант скоростей ключевых реакций на основе полученных автором экспериментальных данных; (2) об отсутствии исследований влияния азота в качестве газа-разбавителя в пламёнах; (3) об отсутствии в предложенном механизме реакций, соответствующих низкотемпературной области окисления эфиров. Кроме того, задан вопрос о

критерии определения точности/неточности описания экспериментальных профилей мольной доли той или иной моделью.

Соискатель имеет 22 научные работы (из них 3 по теме диссертации), опубликованных в отечественных и международных рецензируемых научных изданиях, входящих в список ВАК. Также по результатам диссертационной работы получено свидетельство о государственной регистрации базы данных химических реакций. Семь работ опубликованы в материалах всероссийских и международных конференций и симпозиумов. Личный вклад соискателя в опубликованные работы составляет примерно 80%.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. **A.M. Dmitriev**, K.N. Osipova, D.A. Knyazkova, I.E. Gerasimov, A.G. Shmakov, O.P. Korobeinichev. Comparative Analysis of the Chemical Structure of Ethyl Butanoate and Methyl Pentanoate Flames // *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. – 2018. – V. 54. – №2. – P. 3-14.
2. Osipova K.N., **Dmitriev A.M.**, Shmakov A.G., Korobeinichev O.P., Minaev S.S., Knyazkov D.A. Combustion of ethyl acetate: the experimental study of flame structure and validation of chemical kinetic mechanisms // *Mendeleev Commun.* – 2019. – V. 29 – №6. – P. 690-692.
3. **A.M. Dmitriev**, K.N. Osipova, A.G. Shmakov, T.A. Bolshova, D.A. Knyazkov, P.A. Glaude. Laminar flame structure of ethyl pentanoate at low and atmospheric-pressure: Experimental and kinetic modeling study // *Energy*. – 2021.– V. 215. – № 119115.
4. База данных химических реакций горения этилпентаноата: база данных 2020621112 Рос. Федерация. №2020620955; заявл. 22.06.2020; опубл. 02.07.2020

На автореферат диссертации поступило 6 отзывов. Все отзывы положительные, из них 3 содержат замечания. Отзывы поступили от:

доктора технических наук **Ануфриева Игоря Сергеевича**, заведующего лабораторией радиационного теплообмена Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук;

доктора физико-математических наук **Губернова Владимира Владимировича**, ведущего научного сотрудника лаборатории нелинейной динамики и теоретической биофизики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук;

доктора физико-математических наук **Зеленова Владислава Валерьевича**, главного научного сотрудника лаборатории динамической и кинетической масс-спектрометрии Филиала Федерального исследовательского центра химической физики имени Н.Н.Семёнова Российской академии наук;

кандидата физико-математических наук **Подлесного Дмитрия Николаевича**, научного сотрудника лаборатории технологического горения Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт проблем химической физики Российской академии наук;

кандидата физико-математических наук **Коннова Александра Анатольевича**, профессор отдела физики горения Лундского университета, Лунд, Швеция;

кандидата физико-математических наук **Славинской Надежды Александровны**, координатора инновационных исследований, отдел исследований в области безопасности Общества по безопасности станций и реакторов (GRS gGmbH), Мюнхен, Германия.

В отзывах на автореферат имеются следующие замечания: (1) об отсутствии исследований бедных топливных смесей (**Ануфриев И.С.**); (2) об отсутствии ссылок на используемый метод ионизации и тип масс-анализатора (**Зеленов В.В.**); (3) о недостаточно ясном описании в автореферате исходного механизма, использованного для разработки кинетической модели, представленной в диссертации (**Славинская Н.А.**); (4) об отсутствии в автореферате пояснений, какие именно модификации констант скоростей были проведены и почему (**Славинская Н.А.**), (5) несколько замечаний стилистического и технического характера (**Ануфриев И.С., Зеленов В.В., Славинская Н.А.**).

В положительных отзывах оппонентов имеются следующие замечания и вопросы:

Аязов В.Н. (1) высказал замечание об использованных аббревиатурах и сокращениях названий соединений (2) усомнился в корректности употребления термина «новый кинетический механизм»; (3) высказал замечание о недостаточной аргументации при выборе реакционных путей, подвергшихся модификации. Кроме того, была сделана пара замечаний технического и стилистического характера.

Тимова Н.С. (1) указала на практическую значимость проведения измерений структуры пламени и моделировании именно при повышенных давлениях; (2) указала на целесообразность проверки предложенной в диссертации модели на более широком наборе экспериментальных данных, представленных в литобзоре; (3) указала на отсутствие низкотемпературных каналов окисления эфиров в предложенном механизме; (4) указала на целесообразность проведения расчёта равновесной концентрации ацетилена в конечной зоне богатых пламен (5) задала вопрос, наблюдалась ли сажа или полиароматические соединения при горении богатых смесей эфиров.

Валерий Николаевич Аязов отмечает, что:

«Несмотря на вышеперечисленные недочёты и замечания работа представляет собой полноценное самостоятельное исследование и оставляет только положительное впечатление. В работе прослеживается чёткая логика, выполнен большой объём как экспериментальной, так и расчётно-теоретической работы. Представленные результаты соответствуют мировому уровню, их достоверность и актуальность не вызывает сомнений. Заключение и выводы обоснованы. Положения, выносимые на защиту, содержат оригинальные результаты. Название работы соответствует её содержанию, автореферат и опубликованные статьи правильно и полно отражают содержание диссертации. Всё это указывает на состоятельность А.М. Дмитриева, как самостоятельного исследователя. Из всего вышесказанного делаю вывод, что диссертационная работа «Кинетика горения модельных биотоплив на основе сложных этиловых эфиров» отвечает критериям п.9 Положения о порядке присуждения учёных степеней, утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации

№ 842 от 24 сентября 2013 г., а её автор, Дмитриев Артем Михайлович, заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

Наталья Сергеевна Титова отмечает, что:

«Диссертация представляет собой законченную научно-исследовательскую работу, в которой объединены экспериментальные и численные исследования горения легких этиловых эфиров, проанализированы механизмы их окисления, намечены пути дальнейшего улучшения кинетической модели. Работа выполнена на высоком научном уровне. Полученные результаты обладают новизной и представляют научный интерес. Автореферат полностью соответствует содержанию диссертационной работы. Считаю, что диссертационная работа «Кинетика горения модельных биотоплив на основе сложных этиловых эфиров» отвечает критериям п.9 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г., а ее автор, Дмитриев Артем Михайлович, заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

Во всех отзывах отдельно отмечается, что указанные замечания не снижают научной и практической значимости диссертационной работы. Все отзывы заканчиваются выводом, что диссертационная работа Дмитриева А.М. **полностью соответствует** требованиям, которые ВАК предъявляет к кандидатским диссертациям, а её автор – Дмитриев А.М. – заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается компетентностью оппонентов и сотрудников ведущей организации в области химии горения, что подтверждается наличием у них публикаций ряда научных работ в данной области исследований, в том числе соответствующих тематике

диссертационного исследования соискателя и опубликованных в ведущих российских и международных журналах и изданиях.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- Впервые получены экспериментальные данные по химической структуре пламён этилацетата, этилбутаноата и этилпентаноата, стабилизированных при атмосферном давлении с использованием молекулярно-пучковой масс-спектрометрической установки с мягкой ионизацией электронным ударом.
- На основе современных данных по кинетике окисления лёгких этиловых эфиров разработан улучшенный детальный кинетический механизм горения этилпентаноата, включающий в себя реакции окисления более лёгких этиловых эфиров (этилбутаноата, этилпропаноата, этилацетата и этилформиата). Проведено численное моделирование исследованных пламён с использованием детальных кинетических механизмов.
- Показано, что модернизированный механизм удовлетворительно описывает полученные экспериментальные данные, в частности, более точно предсказывает профили мольной доли лёгких углеводородов по сравнению с представленной в литературе моделью.
- Показано, что предложенный механизм хорошо описывает экспериментальные данные по скорости ламинарного горения смесей этилпентаноата с воздухом в широком диапазоне коэффициентов избытка горючего и давлений.
- Установлено, что использование уточнённых констант скорости реакций отрыва атома водорода значительно изменило распределение первичных путей окисления этилпентаноата и этилбутаноата, что позволило улучшить предсказательную способность модели.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

- Полученные экспериментальные данные по химической структуре пламён этиловых эфиров жирных кислот при атмосферном и субатмосферном давлении могут быть использованы для проверки кинетических механизмов окисления данных соединений.

- Предложенная в работе модель горения этилпентаноата может быть использована как субмеханизм при разработке детального механизма окисления более тяжёлых этиловых эфиров.
- Приведённый в работе анализ и обсуждение путей превращений эфиров указывают на возможные теоретические пути улучшения кинетических схем.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики заключается в том, что предложенный в работе механизм горения этилпентаноата может быть использован для построения скелетного механизма горения лёгких биотоплив на основе этиловых эфиров для практически важных расчётов.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что: *сделанные выводы и полученные научные результаты* основаны на применении современных экспериментальных методов и теоретических подходов; *проведены* тщательные экспериментальные измерения и сопоставление полученных результатов с известной совокупностью экспериментальных данных.

Личный вклад соискателя состоит в сборе и анализе литературных сведений по теме диссертации; подготовке и проведении всей экспериментальной работы, а также выполнении всех численных расчётов и оценок. Соискатель принимал непосредственное участие в постановке научных задач, решаемых в данной диссертационной работе; анализе и обсуждении полученных результатов исследований, формулировке выводов. Подготовка публикаций по теме диссертации осуществлялась совместно с соавторами работ и научным руководителем.

Диссертация выполнена на высоком научном уровне и представляет собой законченное исследование с актуальными задачами и содержательными, фундаментальными и практически важными результатами. Материалы диссертации соответствуют требованиям специальности 01.04.17 «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» (п. 1 "экспериментальные методы исследования химической структуры и динамики

химических превращений», п. 6 «строение, структура и реакционная способность интермедиатов химических реакций» и п. 7 «закономерности и механизмы распространения, структура, параметры и устойчивость волн горения; связь химической и физической природы веществ и систем с их термохимическими параметрами, характеристиками термического разложения и горения»). Совокупность полученных результатов служит хорошей основой для дальнейшего развития и проверки детальных кинетических механизмов окисления и горения биотоплив на основе сложных эфиров.

На заседании 3 марта 2021 г. диссертационный совет пришёл к выводу о том, что диссертация соответствует п.9 «Положения о присуждении ученых степеней» от 24 сентября 2013 г. № 842, и принял решение присудить *Дмитриеву Артему Михайловичу* учёную степень кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 11 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании и голосовании, из 24 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение учёной степени - 18, против присуждения учёной степени - 0, недействительных бюллетеней - 0.

Председатель диссертационного совета,

д-р хим. наук



Онищук Андрей Александрович

Ученый секретарь диссертационного совета,

канд. хим. наук

Поздняков Иван Павлович

«04» марта 2021 г.