

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Яценко Павла Ивановича  
«Исследование термодинамических и кинетических свойств йодсодержащих галогенуглеродов пропанового ряда», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника.

Представленная к защите диссертационная работа Яценко П.И. посвящена изучению термодинамических и кинетических свойств молекул йодтрифторметана  $\text{CF}_3\text{I}$ , изомеров йодгептафторпропана  $n\text{-C}_3\text{F}_7\text{I}$ ,  $i\text{-C}_3\text{F}_7\text{I}$  и изомеров йодпропана  $n\text{-C}_3\text{H}_7\text{I}$ ,  $i\text{-C}_3\text{H}_7\text{I}$ . Термодинамические свойства указанных молекул были определены на основе проведенных квантово-механических DFT вычислений, а константы скорости мономолекулярной диссоциации  $\text{CF}_3\text{I}$ ,  $n\text{-C}_3\text{F}_7\text{I}$  и  $n\text{-C}_3\text{H}_7\text{I}$  получены с использованием экспериментального метода атомно резонансной абсорбционной спектроскопии (АРАС) и теории Райса-Рамспергера-Касселя-Маркуса (РРКМ).

Актуальность темы исследований достаточно подробно и ясно изложена в автореферате. Из-за своих специфических физико-химических свойств различные галогенированные углероды эффективны не только для объемного или поверхностного тушения небольших пожаров, но и для предотвращения образования взрывоопасной атмосферы. Однако на данный момент продолжается поиск новых хладагентов эффективных и экологически чистых одновременно. Среди наиболее перспективных ингибиторов горения можно выделить йодсодержащие галогенуглероды  $\text{CF}_3\text{I}$  (Хладон 1311) и  $\text{C}_3\text{F}_7\text{I}$  (Хладон 21711), но по этим соединениям наблюдается явно выраженный дефицит данных по термодинамическим свойствам и кинетике их первичного разложения.

На основе содержания автореферата можно утверждать, что автором получен ряд оригинальных результатов, отличающихся научной новизной. Среди особенно значимых данных можно отметить:

1. Впервые рассчитанные их первых принципов термодинамические характеристики молекул  $n\text{-C}_3\text{F}_7\text{I}$  и  $i\text{-C}_3\text{F}_7\text{I}$ , такие как энтальпия образования, энтропия, изобарная теплоемкость, и определенная термохимия реакций диссоциации и изомеризации молекул  $\text{C}_3\text{F}_7\text{I}$  и  $\text{C}_3\text{H}_7\text{I}$ .

2. Определенная для широкого диапазона температур и давлений константа скорости мономолекулярной диссоциации  $\text{CF}_3\text{I}$ ,  $n\text{-C}_3\text{F}_7\text{I}$  и  $n\text{-C}_3\text{H}_7\text{I}$ .

3. Впервые рассчитанные по модели на основе теории РРКМ константы скорости диссоциации молекул  $n\text{-C}_3\text{F}_7\text{I}$  и  $n\text{-C}_3\text{H}_7\text{I}$  в пределе высоких и низких давлений, а также в переходной области.

Проведенные автором прецизионный АРАС эксперимент, квантово-механические DFT вычисления на высоком уровне теории и теоретический РРКМ позволяют заключить, что полученные термодинамические и кинетические свойства указанных соединений определены с высокой точностью. Достоверность результатов дополнительно подтверждается хорошим соответствием экспериментальных и теоретических данных, а также согласием с имеющимися литературными сведениями, что является неоспоримым достоинством работы. Значимость обсуждений и выводов в работе была признана мировым научным сообществом, что подтверждается публикациями в рецензируемых

международных журналах и достаточным количеством личных выступлений автора диссертации на российских и международных конференциях.

Полученные новые сведения о термодинамических и кинетических свойствах хладонов  $\text{CF}_3\text{I}$ ,  $n\text{-C}_3\text{F}_7\text{I}$  и  $n\text{-C}_3\text{H}_7\text{I}$  являются фундаментальными характеристиками этих соединений и могут быть использованы в качестве справочной информации для широкого класса теоретических и прикладных задач. В частности, знание значений энтальпии образования, энтропии и теплоемкости требуется для разработки кинетических моделей, необходимых для понимания природы химического ингибирования и точного предсказания процессов взаимодействия хладонов с топливами в очаге возгорания.

Таким образом, на основании автореферата можно заключить, что диссертация «Исследование термодинамических и кинетических свойств йодсодержащих галогенуглеродов пропанового ряда» представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013г., ред. 01.10.2018 г., а ее автор Яценко Павел Иванович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника»

Отзыв составил директор Самарский филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук (СФ ФИАН, 443011, г.Самара, ул. Ново-Садовая, 221, (846)-334-39-18, e-mail: [azyazov@fian.smr.ru](mailto:azyazov@fian.smr.ru))

Д.ф.-м.н.



Азязов Валерий Николаевич

Отзыв заверила Ученый Секретарь СФ ФИАН,

к.ф.-м.н.



Майорова Александра Михайловна

443011, г. Самара, ул. Ново-Садовая, 221, (846)-334-57-64, e-mail: [mayorovaal@gmail.com](mailto:mayorovaal@gmail.com))

дата: 18.11.2021

Самарский филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук (СФ ФИАН)  
443011 г. Самара, ул. Ново-Садовая, 221, СФ ФИАН  
Телефон: (846) 334-14-81, Факс: (846) 335-56-00  
Адрес эл. почты: [laser@fian.smr.ru](mailto:laser@fian.smr.ru)