

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК**

СТЕНОГРАММА

заседания диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02) на базе
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Объединенного института высоких температур Российской академии наук
(125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2)
от 18 октября 2023 г. (протокол № 9)

Защита диссертации **Коршуновой Майи Ручировны**

на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

**«Исследование влияния биотопливных добавок на образование
полиароматических углеводов и сажи при пиролизе этилена»**

Специальность 1.3.14 - теплофизика и теоретическая теплотехника

Москва – 2023

СТЕНОГРАММА

заседания диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02) на базе
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Объединенного института высоких температур Российской академии наук
(125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2)

Протокол № 9 от 18 октября 2023 г.

Диссертационный совет 24.1.193.01 (Д 002.110.02) утвержден Приказом Министерства образования и науки РФ от 26.01.2022 г. № 86/нк в составе 31 человека. На заседании присутствуют 23 человека, из них 11 докторов наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 12 докторов наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника. Дополнительно введены на разовую защиту 0 человек. Кворум имеется.

Председатель – зам. председателя диссертационного совета Д 002.110.02

д.ф.-м.н., профессор Андреев Н.Е.

Ученый секретарь – ученый секретарь диссертационного совета Д 002.110.02

к.ф.-м.н. Тимофеев А.В.

1	Петров О.Ф.	Академик, д.ф.-м.н.	1.3.9	Подключен
2	Андреев Н.Е.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Присутствует
3	Агранат М.Б.	Д.ф.-м.н., с.н.с.	1.3.14	Подключен
4	Амиров Р.Х.	Д.ф.-м.н., с.н.с.	1.3.9	Подключен
5	Баженова Т.В.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Отсутствует
6	Вараксин А.Ю.	Чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор	1.3.14	Присутствует
7	Васильев М.М.	Д.ф.-м.н.	1.3.9	Присутствует
8	Васильев М.Н.	Д.т.н., профессор	1.3.14	Подключен
9	Василяк Л.М.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Присутствует
10	Воробьев В.С.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Отсутствует
11	Гавриков А.В.	Д.ф.-м.н., доцент	1.3.9	Отсутствует
12	Голуб В.В.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.14	Присутствует
13	Грязнов В.К.	Д.ф.-м.н.	1.3.14	Отсутствует
14	Дьячков Л.Г.	Д.ф.-м.н.	1.3.9	Присутствует
15	Еремин А.В.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.14	Присутствует
16	Зейгарник Ю.А.	Д.т.н., с.н.с.	1.3.14	Подключен
17	Зеленер Б.Б.	Д.ф.-м.н.	1.3.9	Присутствует
18	Иосилевский И.Л.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Подключен
19	Кириллин А.В.	Д.ф.-м.н.	1.3.14	Отсутствует
20	Киверин А.Д.	Д.ф.-м.н.	1.3.14	Присутствует
21	Лагарьков А.Н.	Академик, д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Отсутствует
22	Левашов П.Р.	Д.ф.-м.н.	1.3.14	Присутствует
23	Ломоносов И.В.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.14	Отсутствует
24	Медин С.А.	Д.т.н., профессор	1.3.14	Подключен
25	Норман Г.Э.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Подключен
26	Пикуз С.А.	К.ф.-м.н.	1.3.9	Отсутствует
27	Савватимский А.И.	Д.т.н.	1.3.14	Подключен
28	Тимофеев А.В.	К.ф.-м.н.	1.3.9	Присутствует
29	Филиппов А.В.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Подключен
30	Храпак А.Г.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.14	Присутствует
31	Яньков Г.Г.	Д.т.н., с.н.с.	1.3.14	Подключен

ПОВЕСТКА ДНЯ

На повестке дня защита диссертации научного сотрудника лаборатории №19 – Неравновесных процессов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН) **Коршуновой Майи Ручировны** на тему «Исследование влияния биотопливных добавок на образование полиароматических углеводородов и сажи при пиролизе этилена». Диссертация впервые представлена на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника. Диссертация выполнена в лаборатории лаборатории №19 – Неравновесных процессов ОИВТ РАН (125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, jihtr.ru).

Научный руководитель:

Михеева Екатерина Юрьевна – к.ф.-м.н., старший научный сотрудник лаборатории №19 – Неравновесных процессов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук, г. Москва.

Официальные оппоненты:

Власов Павел Александрович - гражданин РФ, д.ф.-м.н., главный научный сотрудник лаборатории окисления углеводородов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики имени Н.Н. Семенова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН; Россия, 199991, г. Москва, ул. Косыгина, д. 4, тел.: +7(495)1372951, chph.ras.ru, e-mail: iz@chph.ras.ru).

Князьков Денис Анатольевич – гражданин РФ, к.ф.-м.н., старший научный сотрудник лаборатории кинетики процессов горения Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химической кинетики и горения имени В.В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук (ИХКГ СО РАН; Россия, 630090, г. Новосибирск, ул. Институтская, д. 3, тел.: (383)3309150 kinetics.nsc.ru, e-mail: knyazkov@kinetics.nsc.ru).

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова (МГУ, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, тел.: (495) 9390126, msu.ru, e-mail: vyl69@mail.ru)

На заседании присутствуют официальные оппоненты д.ф.-м.н., главный научный сотрудник Власов П.А. и к.ф.-м.н., старший научный сотрудник Князьков Д.А., научный руководитель Коршуновой М.Р. к.ф.-м.н., старший научный сотрудник Михеева Е.Ю.

СТЕНОГРАММА

Председатель

Добрый день, уважаемые члены совета и все присутствующие. Разрешите начать наше заседание. Работу нам представит Коршунова Майя Ручировна, и сначала ученый секретарь ознакомит нас с материалами, которые у нас есть.

Ученый секретарь

Дорогие коллеги, переходим к рассмотрению дела. *(Зачитывает данные о соискателе по материалам личного дела и сообщает о соответствии представленных документов требованиям ВАК Министерства образования и науки РФ).*

Председатель

Есть вопросы какие-нибудь? Требуются уточнения? Если нет, тогда давайте перейдем непосредственно к защите. Майя Ручировна, пожалуйста, ознакомьте нас с основными результатами вашей деятельности в рамках выполнения диссертации, у вас 20 минут.

Коршунова М.Р.

Выступает с докладом по диссертационной работе (выступление не стенографируется, доклад Коришуновой М.Р. прилагается).

Председатель

Спасибо, Майя Ручировна. У нас время для вопросов к диссертанту. Прошу, кто хочет спросить что-нибудь? Пожалуйста, Михаил Михайлович.

Васильев М.М.

У меня вопрос экспериментальный. В основном на графиках отмечены точки экспериментальных измерений и проведены некие кривые, которые эти результаты аппроксимируют. Однако не очевидным, на мой взгляд, показался выбор положения этих кривых: как на экспериментальные точки нанесена аппроксимирующая кривая? Методом, например, наименьших квадратов, или как это происходило? И какие погрешности у экспериментальных данных? Мы не увидели нигде «усов». Складывается ощущение, что они больше, чем размер нанесенной точки, а значит, возникает вопрос о величине погрешности. В этом вопрос.

Коршунова М.Р.

Во-первых, соглашусь, что, возможно, не на всех графиках кривые достаточно точно описывают экспериментальные точки. Как они строятся: выбирается полином, которым описываются значения, а он строится методом наименьших квадратов, да.

Насчет погрешности. В методе лазерной экстинкции, если мы говорим об измерениях оптической плотности, погрешность связана с соотношением величины опорного сигнала к шуму, в данной серии экспериментов погрешность составляет порядка 10-15%. Но здесь стоит отметить, что лазерная экстинкция больше ограничена температурой проведения измерений, потому что время работы ударной трубы уменьшается с увеличением температуры, поэтому по времени больше ограничений метода. Сам метод достаточно хороший, данные надежные. Но я согласна с тем, что надо было «усы» указать.

Председатель

Еще вопросы, пожалуйста.

Амиров Р.Х.

Можно вопрос?

Председатель

Да, пожалуйста.

Амиров Р.Х.

У меня два вопроса. Первый вопрос: какая предельная величина для перевода углерода в твердую фазу в ваших смесях? Вы вот назвали цифру 10%. Можно ли ее увеличить?

Коршунова М.Р.

Конечно, если бы мы могли измерять лазерную экстинкцию при более поздних стадиях протекания реакций, то у нас бы доля углерода, перешедшая в конденсированную фазу, возрастала бы. Мы здесь ограничены именно тем временем, при котором измеряли. К тому же концентрации тоже влияют. То есть, если бы мы, возможно, взяли какую-то более концентрированную смесь, то к данному моменту измерения у нас бы больше углерода было бы в конденсированной фазе, если я правильно поняла ваш вопрос.

Амиров Р.Х.

Да-да, меня интересует предельная величина, её нельзя оценить, да, в общем-то?

Коршунова М.Р.

Мы в эксперименте не сможем померить, если весь углерод перейдет в сажу. Во-первых, потому что мы не сможем лазерную экстинкцию осуществить, потому что при таких концентрациях в зашкал уйдет сигнал. Это, во-первых. А во-вторых, нам времена не позволяют. Понятно, через какое-то время весь углерод перейдет в сажу, но мы это время не можем зарегистрировать.

Амиров Р.Х.

Спасибо. И второй вопрос. Он чуть-чуть выходит за рамки вашей диссертации. Каково влияние газовых предшественников на структуру сажи, структуру наночастиц? Что известно из литературы или ваши соображения?

Коршунова М.Р.

Да, спасибо за вопрос. Во-первых, если мы добавляем кислородсодержащее, например, биотопливо, то в смесях могут образовываться молекулы ПАУ, в которые будет встроено атом кислорода. В таком случае они могут влиять так, что поверхностный рост частиц будет происходить хуже, и это будет способствовать менее графитизированным наночастицам, графитизированной саже. Вот так могу ответить. Но также влияет и исходный углеводород, потому что, например, в углеводороде, в котором меньше водорода, например, в ацетилене, там сажа будет более графитизированная, а вот в этилене, поскольку там 4 атома водорода, возможна разница в структуре.

Амиров Р.Х.

Спасибо, я удовлетворен вашими ответами. Очень хорошо.

Председатель

Еще, пожалуйста, вопросы. Пожалуйста, Павел Ремирович.

Левашов П.Р.

Спасибо за хорошую презентацию. У меня вопрос такой. Вот можно ли настроить ударную трубу таким образом, чтобы можно было при одной температуре исследовать и провести много экспериментов для этой температуры, и, может быть, тем самым уменьшить случайную погрешность?

Коршунова М.Р.

Нет, если я правильно поняла ваш вопрос, то у нас разные методики не получается осуществлять в одном эксперименте, потому что, когда появляется сажа, то есть углеродная наночастица, она начинает тепловым излучением засвечивать сигнал ЛИФ. Поэтому нам в любом случае приходится проводить несколько экспериментов для того, чтобы разные методики осуществить. В лазерной экстинкции мы измеряем временной профиль, поэтому мы можем при разных моментах осуществлять измерения. Мы выбрали 1,5 мс, потому что это максимально, что мы можем взять, а 1 мс как промежуточное, при котором удобно анализировать для разных смесей, потому что сажеобразование может в разных смесях находиться на разных этапах для каких-то моментов времени. При 1 мс наиболее удобно проводить измерения.

Левашов П.Р.

Тем не менее, за ударной волной температура какая-то конкретная или всё-таки она меняется в процессе эксперимента?

Коршунова М.Р.

Мы рассчитываем конкретную температуру за отражённой ударной волной, но мы точно знаем, что она падает, потому что этилен поглощает тепло. Но температуру не измеряем. Мы считаем, что в то время измерения, которое у нас есть, основываясь на измерении профиля сигнала давления, в этих условиях какая-то пробка газа сохраняется, а уже после приходит фронт, отраженной от контактной поверхности отраженной ударной волны.

Левашов П.Р.

И второй вопрос. Есть ли у вас практические рекомендации по результатам работы? Какое все-таки биотопливо нужно использовать, исходя из соображений малости сажеобразования, или, может быть, экономических соображений?

Коршунова М.Р.

Я бы сказала, что для биотоплив очень важно, прежде чем думать, использовать его или нет, анализировать его химическую структуру. И смотреть, чтобы было как можно меньше С-С связей, и как можно больше доля кислорода в молекуле. В таком случае то, что добавка будет снижать сажеобразование, вероятнее. А по экономическим соображениям: насколько это в России целесообразно, я бы не стала судить, но вот в Южной Америке, например, бутанол широко уже используется в качестве биотоплива, переработка экономически целесообразна.

Левашов П.Р.

Спасибо.

Председатель

Хорошо, пожалуйста, еще есть вопросы, если я правильно понимаю.

Яньков Г.Г.

Дистанционно, можно вопрос?

Председатель

Да, пожалуйста.

Яньков Г.Г.

Спасибо. Будьте добры, покажите, пожалуйста, слайд, по-моему, он 11-й, я как-то номера там не поймал, где у вас уравнение, температура записана.

Коршунова М.Р.

Ага, этот, да?

Яньков Г.Г.

Да, а вот у вас во втором уравнении C_p константа или нет?

Коршунова М.Р.

Нет, если вы о теплоемкости углерода, то мы записываем ее полиномом.

Яньков Г.Г.

Так, а как он попал под полную производную? Там же должна быть энтальпия или внутренняя энергия? Если изобарная теплоемкость не константа, почему она стала C_p на T , это же не энтальпия.

Коршунова М.Р.

Я сейчас вам так точно не смогу сказать, но в правильности написания формулы я почти уверена.

Яньков Г.Г.

Да, ну, хорошо, спасибо.

Председатель

Ещё есть вопросы, пожалуйста? Нет вопросов. Дистанционно тоже мы никого не видим, да? Хорошо, тогда будем считать, что все необходимые вопросы заданы, и мы должны заслушать руководителя – Михееву Екатерину Юрьевну, и по традиции, пожалуйста, не о работе, а о соискателе.

Михеева Е.Ю.

С Майей мы познакомились в МГТУ имени Баумана. Она тогда работала в ЦИАМ и делала там бакалаврский диплом. На защите этого диплома я их немножко раскритиковала: на мой взгляд, они использовали неправильную схему горения для водорода. После я пригласила ее перейти на работу к нам, и она, недолго думая, перешла. И вот со времен магистратуры она работает у нас. В то время она занималась неравновесным излучением при воспламенении водорода. По окончании она поступила в аспирантуру уже не в МГТУ, как Алексей (*ученый секретарь*) сказал, а в нашу, в ОИВТ РАН, и сменила тематику, начала заниматься сажеобразованием, полиароматическими молекулами. Стоит отметить, что это достаточно крутой переход, потому что при горении водорода 22 реакции, а при сажеобразовании уже сотни или тысячи реакций протекают.

С первых дней работы она активно начала заниматься экспериментом, много различных экспериментальных методов освоила, каждый из них имеет различные нюансы и сложности. Много было ошибок и, соответственно, исправлений. Путь проделан большой. Параллельно с этим ей приходилось очень много работать с литературой, потому что за последние пять-десять лет огромное количество публикаций по сажеобразованию, по кинетике биотоплив выходит и выходило. Также дополнительно она занималась кинетическим моделированием, практически самостоятельно это освоила, разбиралась в подробных механизмах, из огромного количества реакций разбиралась, какие промежуточные соединения образуются, пыталась найти какие-то закономерности. То есть работы проделано огромное количество. Самостоятельно она представляла результаты на различных конференциях. Наверное, все ключевые мероприятия по горению, которые у нас в стране, по крайней мере, проходят, она посетила достаточно успешно. Публикации готовила, в том числе самостоятельно, была там ответственным корреспондентом по дискуссии с ревьюерами, то есть имеет опыт всесторонней научной деятельности. Все это ей осуществить позволили ее личные качества, она очень активная, с большим запасом энергии и сил, дедлайны ее никогда не застигают, как многих из нас, она всегда быстро берется за дело, то есть преград никаких не видит, никакие проблемы ее в общем не

смущают. Поэтому с ней очень приятно работать, считаю, что она вполне уже обладает квалификацией научного сотрудника и заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук.

Председатель

Спасибо, Екатерина Юрьевна. Слово предоставляется ученому секретарю, для ознакомления с отзывами.

Ученый секретарь

Дорогие коллеги, в деле имеется заключение организации, в которой выполнялась работа, это ОИВТ РАН, спасибо за указание на оговорку. Майя Ручириковна закончила аспирантуру ОИВТ РАН. В заключении Объединенного института высоких температур достаточно подробно рассказывается о сути работы. Если позволите, я это пропущу, так как мы только что заслушали и соискателя, и научного руководителя. Указывается, что диссертация Майи Ручириковны рекомендуется к защите на соискание степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14.

Кроме того, в деле есть отзыв ведущей организации. Ведущей организацией выступил Московский государственный университет имени Ломоносова. Отзыв составили ведущий научный сотрудник лаборатории кинетических процессов в газах, д.т.н. **Геннадий Яковлевич Герасимов** и заведующий лабораторией кинетических процессов в газах НИИ механики МГУ, к.т.н. **Владимир Юрьевич Левашов**. Отзыв с замечаниями. Также достаточно подробно описана работа, если позволите, я также это пропущу и перейду к замечаниям.

Первое. В тексте диссертации имеется ряд опечаток. Например, на странице 50 пропущен «кг» в размерности для теплоемкости. Однако, их количество не критично для восприятия материала.

Второе замечание. При построении модели для учета изменения температуры и массы наночастицы делалось предположение о сферичности частицы. Из текста не ясно, насколько обосновано данное предположение. Неясно также, что принципиально нового добавлено в вычислительную модель, в том числе при кинетическом моделировании процесса сажеобразования.

Третье. Из текста диссертации неясно, почему при проведении кинетических исследований смеси сильно разбавлялись аргоном.

Четвертое. Из текста работы неясно, каким образом осуществлялась предварительная подготовка ударной трубы для проведения экспериментов.

Неясно, почему в качестве единицы измерения оптической плотности в смеси использовалась величина размерности метров квадратных на моль.

Шестое. Могут ли результаты работы способствовать поиску альтернативных топлив с низким сажеобразованием?

Отзыв положительный. В результате отзыва отмечается, что диссертация обсуждена и одобрена на расширенном семинаре лаборатории, и диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным пунктом 9 положения порядка присуждений ученых степеней, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14 - теплофизика и теоретическая теплотехника.

Кроме этого, на диссертацию **поступило 6 отзывов**, вернее, отзывов на автореферат поступило. Из них один без замечаний и пять с замечаниями. Сразу обращаю внимание, что **все они положительные**. Если позволите, я пропущу описание работы и что диссертация соответствует требованиям положения о присуждении учёных степеней, а перейду только к замечаниям.

(Первый отзыв) Итак, первый отзыв поступил от начальника отдела и старшего научного сотрудника отдела «Специальные авиационные двигатели и химмотология»,

ЦИАМ, от **Леонида Самойловича Яновского**, доктора технических наук. Замечания следующие.

В схеме роста ПАУ не рассмотрены стадии образования соединений, содержащих более трех колец, которые вносят существенный вклад в сажеобразование.

Второе замечание. Для численного моделирования процесса сажеобразования использовалась программа OpenSmoke++. Была взята известная кинетическая модель и дополнена блоком реакции пиролиза выбранных веществ. Хорошей практикой является размещение в открытом доступе, например, на ресурсе github.com или статьях в качестве приложений, доработанных кинетических моделей для того, чтобы другие ученые-исследователи могли использовать полученные авторам результаты. Такая ссылка в работе отсутствует. Перечисленные замечания носят рекомендательный характер, также написано о соответствии положениям.

(Второй отзыв) Следующий отзыв поступил от директора Института проблем механики имени Ишлинского Российской академии наук, заведующего лабораторией термогазодинамики и горения, д. ф.-м.н., члена-корреспондента РАН, **Сергея Евгеньевича Якуша. Отзыв без замечаний.**

(Третий отзыв) Следующий отзыв поступил от академика РАН, профессора, д.ф.-м.н., **Марковича Дмитрия Марковича** и д.ф.-м.н., доцента **Олега Владимировича Шарыпова**. Отзыв из Института теплофизики им. Кутателадзе, Сибирское отделение РАН. Отзыв с замечаниями.

Первое замечание. Не представлен анализ соответствия физических условий проведенных экспериментов с условиями, характерными для реальных камер сгорания.

Второе замечание. Не указано на основании чего выбраны моменты осуществления диагностики лазерно-индуцированной флюоресценции и определение оптической плотности исследуемых смесей. Отзыв положительный.

(Четвертый отзыв) Следующий отзыв получен от д.ф.-м.н., доцента **В.Н. Аязова** из Самарского филиала Федерального государственного бюджетного учреждения Физического института имени Лебедева Российской академии наук. Замечание следующее. В тексте автореферата приводится обширный список цитируемой литературы. Однако в список не попала недавняя работа, в которой приводится впечатляющий результат по механизму роста ПАУ. Приводится ссылка на авторов *Tuli, Goettl* и последний *Kaiser, 2023* года, опубликованный в Nature Communications.

(Пятый отзыв) Следующий отзыв получен от доцента, к.ф.-м. н., **Константина Алексеевича Тена** из Института гидродинамики имени Лаврентьева, Сибирского отделения РАН. Тоже перейду сразу к замечаниям.

Первое. На странице 11 в автореферате написано, что измерения приводили с задержками 153 и 1153 микросекунды относительно фронта ОУВ. А ниже, на той же странице, написано, что измерение размеров приводилось через полторы мс после прохождения фронта ОУВ. Насколько критична это разница во времени? Хотелось бы знать положение оси измерений, оси окон, относительно фронта ОУВ, например, в калибрах.

Второе замечание. Работа экспериментальная, было проведено очень много прецизионных измерений, которые проведены впервые. Хотелось бы знать точность этих результатов. В автореферате не приведено ни одного значения погрешности (точности) измерений.

Третье замечание. Все формулы и графики проведены в мелком масштабе, и чтобы разобраться в них, надо читать диссертацию. Опять же, отзыв положительный, и все перечисленные замечания носят рекомендательный характер и не снижают общей значимости диссертационной работы.

(Шестой отзыв) Следующее замечание получено от **Анатолия Александровича Васильева**, главного научного сотрудника Института гидродинамики им. Лаврентьева, Сибирского отделения РАН. Есть замечание, основное замечание.

Из автореферата трудно понять текст на рисунках из-за «наноразмера» шрифта. Спасает электронная версия автореферата, которую можно увеличить. Опять же, отзыв положительный.

На этом отзывы на автореферат и замечания закончены.

Председатель

Спасибо. Майя Ручирова, пожалуйста, вам время для ответа на те замечания, которые были в письменных отзывах. Мы вас слушаем.

Коршунова М.Р.

Да, я начну с ответов на замечания ведущей организации. Первый вопрос был касательно допущения о сферичности углеродных наночастиц, как оно влияет на учёт измерения температуры и массы углеродной наночастицы. Ответ можно начать с того, что, поскольку мы получаем фотографии образцов сажи на просвечивающем электронном микроскопе, здесь (*на слайде*) они представлены, как мне кажется, достаточно хорошо видно, что они сферичные. Касательно оценки погрешностей. Во-первых, касательно учёта массы, мы работаем в режимах где нет испарения, поскольку его достаточно тяжело интерпретировать. Но в некоторых работах литературных есть оценка погрешности скорости испарения в случае модели сферической углеродной наночастицы, либо не сферической, при помощи методов эквивалентных объемов, и погрешность составляет не более 5%. Несферичность частицы может больше вносить погрешность в расчет теплового потока за счет излучения, так как в формулу входит площадь поверхности частицы, погрешность составляет порядка 20%. Здесь еще стоит сказать, что основной механизм теплообмена в наших условиях – конвективный. И самое главное, что надо сказать, что несферичность частицы – наименьшее из бед данной модели, поскольку основная погрешность связана с тем, что мы однозначно не знаем оптические свойства частицы, они многое определяют, и поэтому тяжело снизить погрешность за счет того, что как раз мы не знаем данные об оптических свойствах.

Также был вопрос: «Что добавлено в кинетическую модель сажеобразования?». Нового ничего. Мы только добавляли блоки реакций пиролиза биотоплив, которых до этого не было в модели, мы брали их из литературы.

Дальше был вопрос, почему смеси сильно разбавлялись аргоном. Если честно, здесь непонятно, на что акцент, почему сильно или почему аргоном. Почему сильно? Потому что нужно получить достаточно тонкий оптический слой, и добиться отсутствия газодинамических эффектов за счет присутствия молекулярного газа. Почему аргон? Потому что он инертный, тяжелый и недорогой, поэтому его удобно использовать. Еще при его нагреве отсутствуют газодинамические эффекты. В других газах при нагреве может возникать нарастание погранслоя, а вот в аргоне такого нет.

Как осуществлялась подготовка ударной трубы? После каждого эксперимента труба очищается с помощью шомпола от остатков алюминиевой диафрагмы, которая до эксперимента разделяет камеры высокого и низкого давлений. Также шомпол смачивается в этаноле для того, чтобы со стенок ударной трубы убрать остатки углеродных наночастиц, и дальше труба откачивается при помощи пластинчато-роторного насоса.

Почему у оптической плотности использовалась величина метр квадратный на моль, а не безразмерно? Да, я согласна с этим замечанием, скорее надо было бы использовать термин приведенная оптическая плотность, т.к. мы нормируем оптическую плотность на концентрацию углерода, потому что в разных реагирующих смесях она может быть всё-таки разной и отличаться в зависимости от параметров экспериментов, поэтому, чтобы более корректно сопоставлять, нормируем на концентрацию. А для того, чтобы с другими литературными источниками сопоставляться, удобно нормировать на длину оптического пути, то есть на диаметр ударной трубы, поэтому у неё такая размерность.

Вопрос насчёт того, как результаты могут использоваться для поиска альтернативных видов топлив? Я уже говорила о том, что надо брать молекулы, в которых нет C-C связей и относительно много кислорода в молекуле самой.

Касательно отзывов, я с вашего позволения пойду не так, как вы их читали, но у меня вопросы представлены на слайдах.

Был отзыв из института Кутателадзе, почему мы не сопоставляемся с условиями в реальных камерах сгорания? Самый главный ответ, конечно, потому что у нас всё-таки реакции пиролиза, а в реальных энергоустановках реакции окисления. Из-за этого процесс сажеобразования может сильно по-другому протекать. Но здесь хочется подчеркнуть, что, если у вас есть кинетическая модель, которая апробирована на экспериментальных данных в разных условиях, то вы можете посчитать с ее помощью любой процесс, в любой энергоустановке достаточно надежно. И именно в этом ценность данных экспериментов.

Касательно того, как выбраны моменты осуществления диагностики. Для диагностики ЛИФ мы использовали два момента, две задержки измерений: 153 и 1153 микросекунды. 153 микросекунды та задержка, которую мы присваивали начальной стадии пиролиза. Меньше делать смысла не имело, поскольку у нас и при такой задержке достаточно маленькие сигналы были. Можно было сделать больше, но мы как реперную точку для себя взяли такие времена. А касательно измерения оптической плотности, я тоже уже говорила, что по верхней границе мы находимся в рамках времени работы ударной трубы, больше мерить не можем. А одна миллисекунда для разных смесей удобное время для сопоставления.

Касательно замечания Тена Константина Алексеевича из Института гидродинамики. Про задержки: измерения проводились на 153 и 153 микросекунды, и потом то, что размеры определялись через полторы миллисекунды. И критична ли разница по времени? Во-первых, опять же хочется сказать, что это две разные серии экспериментов, поскольку излучение от частиц мешает получению сигналов ЛИФ. Почему для сигналов ЛИФ более маленькие задержки: потому что для формирования ПАУ нужно меньше времени, а для сажи – больше, поэтому времена измерений экстинкции и ЛИИ больше. И касательно того, где находится фронт отраженной ударной волны в момент измерений: если взять, что отраженная ударная волна идет по трубе, и посчитать через её скорость, где она находится, то получится примерно 80-120 калибров, но это в реальности не так, поскольку она отражается от контактной поверхности и уже через полторы миллисекунды приходит в исследовательское сечение, поэтому нам для того, чтобы определить, где она находится в момент измерения, например, одна миллисекунда, нужно знать положение также контактной поверхности, поэтому сказать точно не получается.

Касательно того, что погрешности не приведены. Да, я согласна, моя оплошность. Про метод ЛИФ: поскольку метод качественный, основная его погрешность связана с тем спектральным разрешением, которое мы можем реализовать. В нашей настройке получилось спектральное разрешение порядка 10 нм. А абсолютная величина сигнала при одной температуре варьируется на 10-15%, это не существенно. Касательно лазерной экстинкции я уже ответила. Погрешность ЛИИ составляет порядка 30% из-за того, что мы точно не знаем зависимость оптических свойств частиц от их размера, структуры, и для разных углеводородов они сильно отличаются. Поэтому погрешность для метода определения размеров достаточно большая.

Касательно замечания из ЦИАМ: в отзыве написано, что не рассмотрено более трех колец, но в диссертации рассмотрено до четырех колец. Почему так? Потому что мы уже использовали ту кинетическую модель, которая была. Да, в ней не полностью представлены крупные ПАУ. Они как бы есть, но записаны псевдочастицами, и их химические реакции записаны только с точки зрения сохранения баланса масс, а химически их трактовать сложно, поэтому рассматривалось только до четырех колец. Но здесь хочется, во-первых, подчеркнуть достоинство используемой схемы, поскольку она позволяет оценивать как газовую фазу углерода, так и конденсированную, поэтому она применялась. А во-вторых, в литературе нет однозначных выводов о том, насколько крупные ПАУ являются предшественниками сажи, поэтому непонятно, насколько было бы существенно рассматривать более крупные.

Вроде бы всё. А, ещё было замечание, что не учла литературу. Да, статья 2023-го года, поэтому не успела. В отзыве ЦИАМ ещё было про то, что не опубликована схема, которую мы использовали. В ту схему, которую мы использовали, были добавлены реакции пиролиза биотоплив. Она не выложена, поскольку мы не меняли константы скоростей, ничего со схемой не делали, только добавили в неё химические реакции, поэтому я думаю, что для исследователя она какой-то пользы не принесёт, потому что мы никак её не модернизировали, поэтому она не выложена. Теперь точно все.

Председатель

Спасибо, спасибо, Майя Ручирова. Мы переходим к заслушиванию официальных оппонентов. Я прошу ознакомить нас со своим мнением Павла Александровича Власова.

Власов П.А.

Добрый день. Мне работа понравилась сразу. Я слушал ее и на предзащите, и на семинаре. Проведено огромное количество экспериментов с использованием самых современных методов. Это тот набор методов, который, фактически, во всем мире сейчас используется для исследований сажеобразования. Я бы даже сказал, что, на мой взгляд, слишком много исследовалось добавок, и можно было бы, наверное, чуть-чуть уменьшить этот объем, потому что четвертую главу, где излагаются результаты по влиянию добавок различных классов, читать тяжело. Тем не менее, результаты были получены, они есть, довольно большой этап таких исследований, которые рано или поздно пришлось бы все равно, наверное, делать. Другой вопрос: к чему в конце концов мы пришли? Тезис о том, что добавки все ускоряют, но выход сажи от этого не меняется, вызывает вопрос: если они ускоряют, куда все это девается? Вроде в сажу оно не попадает. Ускоряет, ускоряет, ускоряет, но выход сажи при этом не меняется. Это доводит до остервенения в четвертой главе. Тем не менее, несмотря ни на что, применены все самые современные методы.

Дело в том, что сажа объект очень сложный. Поэтому из абсолютно прямых методов мы можем назвать только, наверное, электронно-оптический микроскоп. Там никуда не денешься. И то, это только кажущаяся простота, потому что как готовится проба, что потом происходит в результате донесения этой пробы до микроскопа, какие там искажения, сказать трудно. Остальные методики и методы фактически качественные, и во многом основаны на том, как исследователи во всем мире договорились. Вот мы договорились, что 633 нанометра в основном поглощает сажа. А 405 нанометров не только сажа. Были еще у Вагнера эксперименты с более длинными волнами, там свои проблемы и свои результаты. Поэтому пальцем ткнуть и сказать: вот сто процентный метод, с погрешностью 5%, который дает нам все параметры сажи, мы не можем. Внедрение ЛИФ – явно, так сказать, новое веяние, но метод действительно качественный, опять же зависит от того, как мы вот договоримся. *(Обращается к диссертанту)* Я не ожидал, что вы так тщательно подготовите ответы на вопросы. Может быть, я забуду какие-то вопросы, я сейчас не зачитываю отзыв, поэтому извините. Вы *(обращается к диссертационному совету)* увидите их на экране *(слайде презентации)*. Перед тем, как я выскажу некоторые замечания: проведенный объем исследований, участие автора в этом, безусловно, говорит о том, что надо сказать, чтобы все голосовали за, что соискатель, безусловно, отвечает, и ее работа отвечает всем требованиям, выдвигаемым ВАК к кандидатским диссертациям, здесь никаких вопросов нет.

Что бросилось в глаза при первом чтении? К сожалению, ни в автореферате, ни сегодня в докладе не было картинки по пиролизу бензола, и что при этом происходит с точки зрения ЛИФ. А график очень показательный, и очень логично было начать с того, что явно дает бензольные кольца. Если взять просто бензол, уже есть бензольное кольцо. Вы начинаете это пиролизовать и видите, что ЛИФ показывает явное движение в сторону длинных волн, что согласуется с графиком, который показывает, что чем крупнее ПАУ, тем дальше мы видим сдвиг в сторону длинных волн. Как раз на бензоле авторы прекрасно с точки зрения ЛИФ это увидели. Картинка эта как-то ушла. А замечание мое было о том, что

теперь, если мы берем этилен и начинаем его пиролизовать, никакого сдвига вправо не видно. Видно увеличение амплитуды, но никакого сдвига вправо нет. Тут я могу сказать о нашей разработанной единой кинетической модели сажеобразования, где мы тщательно, не столь шикарными методами, но тем не менее, методами экстинкции на длине волны 633 нм, прошлись по всем простейшим углеводородам, начиная с метана и заканчивая толуолом, и даже некоторыми более сложными ароматическими молекулами. В этой серии два углеводорода никак не хотели подчиняться общему правилу: это ацетилен и этилен. Они идут своим путем к саже. Каким? Ну, честно говоря, мы написали некоторые свои соображения. Они пока упрощенные, их надо развивать, но тем не менее они (*ацетилен и этилен*) выбиваются из общего правила и очень может быть это как раз и отражает то, что при попытке пиролизовать этилен и натравить ЛИФ, мы не видим вот этого выраженного сдвига в сторону крупных ПАУ. Может быть там действительно что-то более простое, 1-2 кольца, а может быть там и колец даже, в таком виде, в каком мы привыкли, не образуется. Это очень важно, потому что, если вы зафиксируете в сложной кинетической модели все константы и уже больше ничего не будете изменять в ней, а в эксперименте меняете только состав смеси, температуру и давление, это очень показательный эксперимент. Это довольно сложная вещь, я вам скажу, добиться того, чтобы ваша кинетическая модель количественно описала ударно-трубный эксперимент во всех углеводородах: метан, этилен, пропан, пропилен, их довольно много. А здесь может что произойти: если этилен действительно выделяется своим особым механизмом, то добавки, которые дают CH_3 , способствуют тому, что CH_3 дает возможность образоваться фрагментам с нечетным числом углерода, прийти к C_3H_3 и получить первое бензольное кольцо. И, безусловно, любой добавкой, которая будет давать CH_3 , мы будем стимулировать образование сажи.

Но это я к тому, что, как Фрэнклек написал недавно в своей работе, сажи быть вроде бы и не должно. Потому что ни одна модель на сегодняшний день, строго из самых общих соображений, не ведет к образованию конденсированной фазы углерода из таких вот фрагментов. Обратные реакции все разрушают. Поэтому вопрос стоит до сих пор. Мы можем говорить только о моделях сажеобразования. А модели сажеобразования – дело вкусовое, и что сказать? Вот эти замечания в основном-то и влияют на конечные выводы. Потому что, если бы автор уменьшил количество перебранных добавок, сконцентрировался бы на разнице между пиролизом бензола и этилена, может быть, она была бы интереснее. Тем не менее, результаты получены, никаких сомнений, что они проведены правильно, у меня нет, и это на энциклопедию больше похоже. Поэтому я всех призываю голосовать за, несмотря на те вопросы, которые я тут сформулировал.

Председатель

Спасибо, Павел Александрович. Пожалуйста, Майя Ручириновна, ответьте на вопросы.

Коршунова М.Р.

Да, я попробую кратко ответить. Во-первых, касательно четвертой главы, что добавки ускоряют, но не увеличивают выход сажи. Концентрация углерода поддерживалась постоянной, чтобы корректно мерить ЛИФ, то есть там сколько углерода было в этилене, столько же и с добавкой, поэтому увеличения не было.

Касательно того, что получились разные результаты в разных углеводородах. Поскольку я не представляла результаты с бензолом в презентации, я здесь (*на приведенном слайде*) их покажу. Действительно для бензола хорошо виден сдвиг в область больших длин волн с увеличением температуры. Вы правильно заметили, что бензол взят для тестовой серии, поскольку мы точно знали, что, так как это ароматическая молекула, там много ПАУ, много сажи, отладили метод ЛИФ на нем, у нас все красиво получилось, и мы решили, что в других углеводородах все так же получится качественно красиво. Но поскольку в этилене сажи сильно меньше, чем в бензоле, возможно, в области больших длин волн, из-за маленькой концентрации ПАУ, мы не смогли зарегистрировать ЛИФ, т.к. не хватило

чувствительности. Это может быть первым фактором, почему не получилось. А второй фактор может быть связан с тем, что в этилене температурный диапазон, когда крупные ПАУ уже есть, а сажи нет, уже, чем в бензоле. Поэтому в бензоле получилось температурно разрешить, а в этилене нет. Но глобальный вывод о том, что механизм образования сажи в разных углеводородах разный сделать не можем, потому что мы видим для обоих углеводородов, что сначала формируются маленькие, а затем крупные ПАУ. Вопрос в том, что крупные ПАУ в этилене методом ЛИФ мы не смогли зарегистрировать. Но крупные ПАУ регистрировались с помощью лазерной экстинкции на 405 нм. Поэтому я бы не взялась сказать, что в этилене совсем другой механизм. Но могу анонсировать, что нам предстоит измерение ЛИФ в ацетилене. Возможно, мы еще вернемся к этому обсуждению.

Председатель

Спасибо, Майя Ручирична. Мы тогда переходим к заслушиванию второго оппонента, Дениса Анатольевич Князькова. Пожалуйста.

Князьков Д.А.

Во-первых, все здесь получили удовольствие только один раз. Они заслушали прекрасный доклад, а я имел удовольствие еще и прочитать диссертацию. Я поддерживаю Павла Александровича, мне она тоже совершенно понравилась.

Во-первых, поразило количество методов оптических. Лаборатория Александра Викторовича фактически напичкана этими методами, и они все это в диссертации применили, и все это гармонично вписалось в рамки одной работы. Мне кажется, это совершенно блестяще сделанная экспериментальная работа. И знаете, я пока читал диссертацию, пробовал считать количество пусков. У меня получилось где-то, может быть, около 500. Потом я спросил у научного руководителя, сколько примерно в день можно сделать пусков? Она ответила, что это зависит от разных условий, максимум 5. То есть получается, если где-то 2 в день делать, то 500 пусков это 250 дней, которые нужно было потратить, чтобы только эксперименты сделать. Потом представьте, сколько это обрабатывать, если вы видели какие тут методики используются, это исключительно сложно. Поэтому я просто, так скажем, восхищен. А что еще я хотел сказать? Давайте я к замечаниям перейду, я приготовил их, чтобы мне их не забыть.

Первое замечание, которое я сделал, следующее: автор провел сравнительный анализ данных и ранжировал их по способности различных соединений к образованию сажи. Но самое интересное, что в этой ранжировке не приведен сам этилен. На каком он месте стоит? То ли он больше всех способствует образованию, то ли наоборот, где-то в середине. Вот нужно было это, как минимум, показать.

Второе замечание: не всегда поддерживалось постоянное содержание углерода в смеси. Казалось бы, если ты смотришь влияние вот этой добавки, нужно поддерживать. Мне кажется, что это связано с какими-то экспериментальными сложностями, о которых я не знал, и, по крайней мере, это непонятно из диссертации.

Потом диссертант приводила анализ путей образования ПАУ и сажи. И самое интересное, в диссертации буквально одна строчка об этом анализе: провели анализ путей реакций, используя rate of production analysis. А как, при какой температуре, интегральный или не интегральный, в какой-то точке, это непонятно.

Следующее замечание: все умозаключения по поводу этих реакций были сделаны на основе анализа механизма CRECK, это известная группа из Италии, которая занимается моделированием кинетики. Известный механизм, да, я понимаю, но в мире есть еще и другие механизмы для образования полиароматики, даже, например, два механизма Agatso, или Павел Александрович тоже разрабатывает механизмы, еще какие-то другие есть. Не сказано в диссертации, почему они выбрали именно этот механизм, нужно было доказательства какие-то тому привести.

И в конце концов небольшое замечание: не совсем было понятно, как готовились сами смеси в газовой фазе. Я из диссертации не понял, как была сделана подготовка, потому что все биотоплива жидкости в основном, и, если использовался насыщенный пар, он же может конденсироваться в какой-то момент. Хотелось бы знать какие-то тонкости.

Что касается в принципе того, как написана диссертация: она прекрасно написана, я скажу, опечаток довольно мало, то есть практически нет опечаток, что очень здорово. Что-то удалось найти, и я решил, надо это вставить в отзыв. Поэтому, в целом я хочу сделать заключение, что это прекрасная работа, и, наверное, я должен такую протокольную фразу сказать: отмеченные замечания не снижают общего положительного впечатления о работе Майи Ручировны, и диссертация представляет собой законченную научную квалифицированную работу, которая соответствует всем критериям и заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук.

Председатель

Спасибо, Денис Анатольевич. Пожалуйста, Майя Ручировна, вам слово.

Коршунова М.Р.

Первое было замечание о том, что в схемке склонности к сажеобразованию не указаны наши исходные углеводороды. Если вы помните, то там наибольшей склонностью обладал фуран. Еще больше, чем в фуране, сажи образуется в бензоле, затем идет фуран, потом этилен. Его склонность к сажеобразованию больше, чем исследованных нами биотоплив.

Если говорить о том, как проводился анализ протекающих реакций, чтобы получить схемы образования ПАУ: интегрально его сделать невозможно, потому что по мере протекания химических реакций какие-то радикалы уже образовались и расходовались, какие-то только начинают образовываться. Это делалось так: оценивался временной профиль интересующего радикала, максимум концентрации сопоставлялся с временем, и при этом времени проводился ROP-анализ. И так по цепочке от этилена дальше к остальным радикалам проводился анализ.

Почему концентрация углерода не поддерживалась постоянной? Если бы я сейчас заново начинала делать всю эту серию, то я бы поддерживала везде концентрацию углерода постоянной. Но дело в том, что изначально мерились объемные доли сажи и размеры частиц при помощи экстинкции на 633 нанометра и ЛИИ. Нам казалось, что постоянная концентрация углерода не настолько принципиальна, потому что объемные доли нормируются на концентрацию углерода. А потом мы перешли к методу ЛИФ, и стали использовать смеси с постоянным количеством углерода, потому что там это существенно. Но потом лазерную экстинкцию переделали.

Касательно того, почему механизм CRECK. Да, я согласна, есть много механизмов, в которых классы ПАУ гораздо более широко описаны. Но основная причина, почему мы пользуемся именно этим механизмом состоит в том, что в нем есть и газовая фаза ПАУ, и конденсированная. Большинство моделей, в которых хорошо представлены ПАУ, в них углерод дальше никуда не переходит, и невозможно отследить, что там происходит, а здесь вот хорошо, что есть и конденсированная фаза.

А касательно того, как мы делаем смеси: если что-то жидкость, то парциальное давление в исследовательской смеси жидкой добавки меньше, чем давление насыщенных паров. У нас особых проблем не возникало, только с бутанолом. У него маленькое давление насыщенных паров, и надо было ждать теплой погоды, чтобы все хорошо получалось. Вот, вроде бы все.

Председатель

Спасибо, Майя Ручириовна, у нас время для дискуссий. Да, Александр Викторович, пожалуйста.

Еремин А.В.

Прошу прощения у диссертационного совета, но не могу молчать, что называется. Вы знаете, я начну с того, что в этом году мы проводили в последний путь Татьяну Валериановну Баженову, которая три недели не дожила до своего столетия. Татьяна Валериановна основала коллектив, который сейчас состоит из двух лабораторий, нашей лаборатории и лаборатории Виктора Голуба. Когда мы, больше 50 лет назад, пришли с Виктором в этот коллектив, это был чисто женский коллектив. Татьяна Валериановна возглавляла его и было две ведущих сотрудницы: Идея Михайловна Набоко и Людмила Георгиевна Гвоздева. И в то время этот коллектив уже был хорошо известен во всем мире, как коллектив, занимающий передовые позиции в исследовании ударных труб, в исследовании ударных волн. Прошли годы, поколения сменялись, и вот порядка 15 лет назад к нам в коллектив пришла Катя Михеева, ещё студентка. И буквально через несколько недель я с удивлением обнаружил, насколько успешно она работает со всей этой тяжёлой техникой: глубокий вакуум, высокое давление, электроника сложная. За эти годы, мы все знаем, Катя стала ведущим сотрудником нашей лаборатории, у неё возникла своя команда. И вот, значит, сегодня мы слушаем защиту Майи, которая прекрасно продолжает эту работу. За время работы Майи установка оснастилась дополнительными очень сложными лазерными методами, которые Майя мгновенно и очень хорошо освоила, не только само проведение тяжелого ударно-трубного эксперимента, но и его анализ. Кинетическая модель, о которой Катя в рассказе о Майе упомянула, тоже включает, кроме газовой кинетики, сотни компонентов, тысячи реакций, еще очень сложный процесс описания перехода от газовой фазы к конденсированной фазе. Так что Татьяне Валериановне не было бы стыдно за женскую команду в нашей лаборатории. И мне остается только пожелать дальнейших больших успехов как Кате, так и Майе. А в Майе мы сегодня видим уже вполне квалифицированного специалиста. Я думаю, нет сомнений о том, что она достойна присвоения степени. Спасибо.

Председатель

Спасибо, Александр Викторович. Ещё есть какие-нибудь соображения? Да, пожалуйста, Алексей Дмитриевич.

Киверин А.Д.

Коллеги, да, Николай Евгеньевич сказал, что в общем-то, все довольно предельно ясно, и в общем-то, все ключевые положения были озвучены. Они многократно звучали и за пределами этого зала на ведущих конференциях, и в самых ведущих изданиях по этому направлению, отзывы подготовили все самые ведущие исследователи, которые занимаются в этой области, поэтому здесь в состоятельности и добротности работы сомневаться не приходится. В общем-то, как, собственно, и в квалификации Майи Ручириовны, которая давно у нас работает и себя проявила как ответственный сотрудник и вполне заслуживает степени кандидата наук, поэтому я предлагаю совету поддержать, и, соответственно, принять, диссертацию.

Председатель

Спасибо, спасибо Алексей Дмитриевич. Я думаю, что достаточно нам для обсуждения, или еще есть остро желающие выступить? Если нет, тогда заключительное слово соискателю.

Коршунова М.Р.

Ну, хочется сказать большое спасибо диссертационному совету и всем собравшимся за то, что дали возможность выступить и представить результаты. Это камень с души.

Большое спасибо. Хочется сказать большое спасибо всему коллективу нашей лаборатории, потому что мои коллеги никогда не оставляют наедине с проблемами: ты всегда можешь прийти, и любом вопросе тебя поддерживают, не оставляют наедине с проблемами экспериментатора, т.е. не только в обсуждении результатов, но и в каких-то более бытовых вопросах. Хочется сказать спасибо Саше Дракону за то, что помогал в расчетах. Рому Колотушкина, который не только помогал мне экспериментально обрабатывать некоторые результаты, но и поддерживал изо дня в день, особенно хочется поблагодарить. Хочется сказать большое спасибо научному руководителю – Екатерине Юрьевне. Вообще я бы здесь не оказалась, если бы она не взяла меня студенткой, не научила бы, как надо считать реакции горения водорода. Но не только за то, что я здесь, но и за то, что было много труда в меня вложено за эти годы. Возможно, не все усвоилось, но большое спасибо, я еще поднажму. Да, большое спасибо оппонентам за то, что некоторые вообще приехали издалека. Но независимо от этого, видно, что работу читали и вчитывались, и вопросы ценные не только в плане диссертации, но и на будущее иметь их в виду. Большое спасибо ведущей организации за то, что целый семинар устроили, чтобы меня послушать. В общем, да, всем большое спасибо.

Председатель

Очень хорошо. Переходим к заключительному этапу. У нас по существу два мероприятия должно произойти: голосование и обсуждение проекта заключения. Мы уже можем покидать наши места в этом процессе и, наверное, использовать то, что приготовили нам для поддержания сил. Как голосовать ученый секретарь напомнит.

Ученый секретарь

Дорогие коллеги, наше заседание проводится в комбинированном очно-дистанционном режиме. Голосование проводится с использованием телекоммуникационных систем, а именно на сайте нашего института. Поэтому прошу всех присутствующих членов диссертационного совета войти под своим логином и паролем на сайт ОИВТ РАН с помощью своих устройств или с помощью компьютера диссертационного совета и проголосовать. Если возникают вопросы, спрашивайте.

Председатель

Приступайте, пожалуйста, товарищи. Да, и те, кто освободились, читайте, пожалуйста, проект заключения диссертационного совета и ждем ваших замечаний. *(Проводится процедура тайного голосования).*

Ученый секретарь

Дорогие коллеги, голосование завершилось. Сейчас буду объявлять результаты голосования: всего присутствовало на заседании 23 члена диссертационного совета, в том числе докторов наук по профилю рассматриваемой диссертации 12, очно присутствовало 12 членов диссертационного совета, в том числе очно по профилю рассматриваемой диссертации – 6 человек, дистанционно присутствовало 11 членов диссертационного совета, 6 из них – по профилю рассматриваемой диссертации. Получено 23 голоса: 23 – за, 0 против.

Председатель

Спасибо. Мы должны утвердить, а потом похлопать. Кто за? Против нет? Воздержавшихся нет? *(Протокол счетной комиссии утвержден единогласно).*

Переходим к обсуждению проекта заключения. Есть замечания, пожелания? *(Члены диссертационного совета обсуждают проект заключения).* Если больше нет желающих обсуждать проект, тогда мы должны за него проголосовать с теми замечаниями, которые были высказаны. Кто «за заключение» с замечаниями, которые были указаны? Единогласно. Товарищи, которые дистанционно, если есть те, кто «против», подайте голос.

Нет. Кто «воздержался»? Нет. Спасибо, принято единогласно.
(Проект заключения принят единогласно).

Спасибо большое, поздравляем.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.193.01
(Д 002.110.02), СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ВЫСОКИХ
ТЕМПЕРАТУР РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА
СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 18.10.2023 г. № 9

О присуждении Коршуновой Майе Ручировне, гражданке Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Исследование влияния биотопливных добавок на образование полиароматических углеводородов и сажи при пиролизе этилена» по специальности 1.3.14 - теплофизика и теоретическая теплотехника; принята к защите 7.08.2023 г., (протокол заседания № 3) диссертационным советом 24.1.193.01(Д 002.110.02), созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (125412, г. Москва, Ижорская ул., д. 13, стр. 2, (495) 485-8345, jiht.ru), утвержденного Приказом Министерства образования и науки Российской Федерации № 105/нк от 11.04.2012г.

Соискатель Коршунова Майя Ручировна 1995 года рождения, в 2019 году окончила магистратуру Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)».

Работает в должности научного сотрудника лаборатории № 19 – неравновесных процессов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

В 2023 году окончила очную аспирантуру Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

Диссертация выполнена на базе лаборатории неравновесных процессов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

Научный руководитель кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории неравновесных процессов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук, Михеева Екатерина Юрьевна.

Официальные оппоненты:

- доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник лаборатории окисления углеводородов Федерального исследовательского центра химической физики имени Н.Н. Семенова Российской академии наук, Власов Павел Александрович;

- кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории кинетики процессов горения Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химической кинетики и горения имени В.В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук, Князьков Денис Анатольевич;

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Научно-исследовательский институт механики являющийся структурным подразделением Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова в своем положительном заключении, составленном

ведущим научным сотрудником лаборатории кинетических процессов в газах д.т.н. Герасимовым Г.Я. и заведующим лабораторией кинетических процессов в газах НИИ Механики МГУ к.т.н. Левашовым В.Ю. (утвержденном 19 сентября 2023г. проректором МГУ имени М.В. Ломоносова Федяниным А.А.) указала, что научная значимость работы определяется в первую очередь новизной полученных экспериментально и численно данных о характере влияния кислородсодержащих добавок на сажеобразование при пиролизе этилена. Получены данные об эволюции спектров ЛИФ различных классов ПАУ в смесях с присутствием биотоплив. Интересны также результаты численного моделирования, дающие оценку кинетических эффектов присутствия кислородсодержащих биотоплив на процессы сажеобразования при пиролизе этилена, а также оценка падения температуры на момент проведения измерений, связанного с теплопоглощением на распад этилена.

Результаты работы могут быть использованы в научно и научно-образовательных центрах, а также организациях, разрабатывающих различные углеродные материалы или альтернативные виды топлив, в частности, в Объединенном институте высоких температур РАН, Институте химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН, ФИЦ Химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Московском государственном техническом университете им. Н.Э. Баумана, Калининградском государственном техническом университете, компаний «Газпром нефть», «КАМАЗ», «Лукойл», «Омск Карбон Групп», «Приволжская биотопливная компания», «Татнефть», «ЭкоЭксперт».

Соискатель имеет 13 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано в рецензируемых научных изданиях 5 работ:

1. A. Drakon, A. Eremin, M. Korshunova, E. Mikheyeva. PAH formation in the pyrolysis of benzene and dimethyl ether mixtures behind shock waves// *Combust. Flame*, 2021, V. 232, 111548.
2. А. Дракон, А. Еремин, М. Коршунова, Е. Михеева. Сажеобразование при пиролизе этилена с добавками фурана и тетрагидрофурана// *Физика горения и взрыва*, 2022, Т. 58, № 4, С. 41-51.
3. А. Еремин, М. Коршунова, Е. Михеева. Сажеобразование при пиролизе этилена с добавками метанола и бутанола// *Горение и взрыв*, 2022, Т. 15, № 1, С. 22-29.
4. D. Nativel, S. Peukert, J. Herzler, A. Drakon, M. Korshunova, E. Mikheyeva, A. Eremin, M. Fikri, C. Schulz. Shock-tube study on the influence of oxygenated co-reactants on ethylene decomposition under pyrolytic conditions// *Proceed. Combust. Inst.*, 2023, V. 39, P.1099-1108.
5. А. Дракон, А. Еремин, В. Золотаренко, М. Коршунова, Е. Михеева. Экспериментальное исследование образования ПАУ и сажи при пиролизе этилена с добавками ДМЭ, ДЭЭ и ДММ// *Физика горения и взрыва*, 2023, Т.59, №2, С. 69-82.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. **Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теплофизики имени С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук** (директор, академик РАН, профессор, д.ф.-м.н., Маркович Д.М., зам. директора по научной работе д.ф.-м.н. Шарыпов О.В.) – отзыв положительный, с замечаниями:

- Не представлен анализ соответствия физических условий проведенных экспериментов с условиями, характерными для реальных камер сгорания;
- Не указано, на основании чего выбраны моменты осуществления диагностики лазерно-индуцированной флюоресценции и определения оптической плотности исследуемых смесей.

2. **Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт гидродинамики имени М.А. Лаврентьева Сибирского отделения Российской академии наук** (ведущий научный сотрудник лаборатории физики взрыва, к.ф.-м.н. Тен К.А.) – отзыв положительный, с замечаниями:

- На стр.11 в автореферате написано, что измерения проводились с задержками 153 и 1153 мкс относительно фронта ОУВ. А ниже (на той же странице) написано, что измерения размеров проводились через 1,5 мс после прохождения фронта ОУВ. На сколько

критична эта разница по времени. Хотелось бы знать положение оси измерений (оси окон) относительно фронта ОУВ (например, в калибрах).

- Работа экспериментальная, было проведено очень много прецизионных измерений, которые проведены впервые. Хотелось бы знать точность этих результатов. В автореферате не приведено ни одного значения погрешности (точности) измерений.

- Все формулы и графики приведены в мелком масштабе и, чтобы разобраться в них, надо читать диссертацию.

3. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт гидродинамики имени М.А. Лаврентьева Сибирского отделения Российской академии наук (главный научный сотрудник лаборатории газовой детонации, профессор, д.ф.-м.н. Васильев А.А.) – отзыв положительный, с замечанием:

- из автореферата трудно понять текст на рисунках из-за «наноразмера шрифта», спасает электронная версия автореферата, которую можно увеличить.

4. Самарский филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института имени П.Н. Лебедева Российской академии наук (директор, д.ф.-м.н., доцент Аязов В.Н.) – отзыв положительный, с замечаниями:

- в тексте автореферата приводится обширный список цитируемой литературы, однако в список не попала недавняя работа, в которой приводятся впечатляющие результаты по механизмам роста ПАУ: Tuli, L.B., Goettl, S.J., Turner, A.M., Howlader, A., H., Nemberger, P., Wnuk, S.F., ... & Kaiser, R.I. (2023). Gas phase synthesis of the C40 nano bowl C40H10. *Nature Communications*, 14(1), 1527.

5. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем механики имени А.Ю. Ишлинского Российской академии наук (член-корреспондент РАН, д.ф.-м.н. Якуш С.Е.) – отзыв положительный, без замечаний.

6. Государственный научный центр, федеральное автономное учреждение «Центральный институт авиационного моторостроения имени П.И. Баранова» (начальник отдела «Специальные авиационные двигатели и химмотология» д.т.н. Яновский Л.С., старший научный сотрудник отдела «Специальные авиационные двигатели и химмотология» к.т.н. Молоканов А.А.) – отзыв положительный, с замечаниями:

- В смехе роста ПАУ не рассмотрены стадии образования соединений, содержащие более трех колец, которые вносят вклад в сажеобразование.

- Для численного моделирования процессов сажеобразования использовалась программа OpenSMOKE++. Была взята естественная кинетическая модель и дополнена блоком реакций пиролиза выбранных веществ. Хорошей практикой является размещение в открытом доступе, например, на ресурсе github.com или в статьях в качестве приложений, доработанных кинетических моделей, для того, чтобы другие ученые и исследователи могли использовать полученные автором результаты. Такая ссылка в работе отсутствует.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается:

- д.ф.-м.н., Власов П.А. является ведущим в России ученым в области исследований процессов сажеобразования, а также крупным специалистом по применению оптических средств диагностики в постановке ударно-трубного эксперимента.

1. P. A. Vlasov, E. Busillo, V. Arutyunov. Influence of oxygen on soot formation during acetylene pyrolysis// *Mendeleev Commun.*, 2022, V.32, I. 5, P. 700-702.

2. P. A. Vlasov, A. Akhnyanov, V. Smirnov. Experimental studies and simulation of methane pyrolysis and oxidation in reflected shock waves accompanied by soot formation// *Kinet.Catal.*, 2022, V. 63, I. 2, P. 141-156.

3. P. A. Vlasov, G. L. Agafonov, D. I. Mikhailov, V. N. Smirnov, A. M. Tereza, I. V. Zhiltsova, A. E. Sychev, A. S. Shchukin, D. N. Khmelenin, A. N. Streletskii, A. B. Borunova, S. V. Stovbun. Shock-tube study of the formation of iron, carbon, and iron-carbon binary nanoparticles: experiment and detailed kinetic simulations// *Combust. Sci.Technol.*, 2019, V. 191, P. 243-262.

- к.ф.-м.н., Князьков Д.А. является признанным специалистом в области исследования процессов горения различных видов топлив, в том числе этилена; соавтор работ, посвященных исследованию влияния биотоплив на процессы горения этилена;

соавтор разработанного редуцированного кинетического подмеханизма горения кислородсодержащего биотоплива – диметилового эфира.

1. D. Knyazkov, A. Shmakov, A. Cherepanov, V. Kiselev, I. Gerasimov, T. Kasper. Experimental and kinetic modeling study of the positive ions in premixed ethylene flames over a range of equivalence ratios// *Proceed. Combust. Inst.*, 2023, V. 39, I. 2, P. 1753-1761.

2. D. Knyazkov, A. Shmakov, O. Korobeinichev, A. Dmitriev, S. Ma, X. Zhang, B. Mei, Y. Li. Revisit laminar premixed ethylene flames at elevated pressures: A mass spectrometric and laminar flame propagation study// *Combust. Flame*, 2021, V. 230, 111422.

3. D. Knyazkov, T. Bolshova, V. Shvartsberg, A. Dmitriev. Flame structure and a compact reaction mechanism for combustion of dimethyl ether at atmospheric pressure// *Fuel*, 2019, V. 255, 115752.

- Научно-исследовательский институт механики, являющийся структурным подразделением Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, является профильной организацией, специализирующейся на гидроаэродинамике нестационарных процессов в газообразных и жидких средах, формулировке новых механико-математических моделей для описания явлений в средах с осложненными свойствами, в том числе с протеканием химических реакций. В лаборатории кинетических процессов в газах ведутся интенсивные работы по изучению кинетики физико-химических процессов, происходящих в высокотемпературных газовых потоках, по обеспечению газовой динамики необходимыми моделями процессов и коэффициентами этих моделей; ведется изучение процессов воспламенения углеводородов, активно применяются различные спектральные методы диагностики в постановке ударно-трубного эксперимента; разрабатываются модели расчета испарительного потока в результате конденсации; изучаются углеводородные соединения, образующиеся в процессах неполного сгорания транспортных топлив, и их влияние на окружающую среду.

1. A.M.Tereza, P.V. Kozlov, G.Ya. Gerasimov, V.Yu. Levashov, I.E. Zamelinsky, N.G. Vykova. Shock-tube study of high-temperature ignition of propane-air mixtures at elevated pressures// *Acta Astronautica*, 2023, V. 204, P. 705-710.

2. В.Ю. Левашов, В.О. Майоров, А.П. Крюков. Изменение величины испарительного потока в результате объемной конденсации пара вблизи межфазной поверхности// *Письма в ЖТФ*, 2023, Т. 49, С. 9-12.

3. Г.Я. Герасимов, В.Ю. Левашов. Кинетические модели горения бензина. *Химическая физика*, 2023, Т. 42, С. 12-26.

4. Г.Я. Герасимов. Рассеяние, фотохимическое преобразование и биоаккумуляция вредных веществ вблизи автострады. *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*, 2021, Т. 22, С. 1-24.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

– установлена склонность биотоплив к сажеобразованию в условиях пиролиза: наименьшая у метанола CH_3OH , бутанола C_4H_9OH , диметилового эфира CH_3OCH_3 и диметоксиметана $CH_3OCH_2OCH_3$, средняя у диэтилового эфира $C_2H_5OC_2H_5$ и тетрагидрофурана C_4H_8O , высокая у фурана C_4H_4O .

– показано, что присутствие кислородсодержащих биотоплив ускоряет формирование крупных (3-4 кольца) ПАУ при пиролизе этилена;

– определены кинетические пути влияния кислородсодержащих биотоплив на формирование ПАУ при пиролизе этилена;

– обнаружено, что в условиях пиролиза выбранные добавки кислородсодержащих биотоплив, а именно: спирты (метанол, бутанол), линейные (диметиловый эфир, диэтиловый эфир, диметоксиметан) и циклические эфиры (фуран и тетрагидрофуран) ускоряют процессы распада этилена и сажеобразование за счет образования в качестве промежуточных соединений метильного CH_3 и этильного C_2H_5 радикалов, а также пропилена C_3H_6 в случае бутанола;

– определены температурные зависимости размеров образующихся углеродных наночастиц.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

Данные о ЛИФ ПАУ при различных температурах, в совокупности с температурными зависимостями оптической плотности исследованных смесей и размеров образующихся углеродных наночастиц, могут быть полезны с точки зрения развития кинетических моделей сажеобразования и использоваться при валидации разрабатываемых моделей для кислородосодержащих биотоплив.

Значение полученных соискателем результатов **исследования для практики подтверждается** тем, что:

- полученные экспериментальные данные ЛИФ различных классов ПАУ могут использоваться для развития средств их оптической диагностики;
- температурные зависимости размеров образующихся наночастиц и распределения частиц по размерам могут использоваться для разработки процессов промышленного производства сажи с заданными свойствами;
- установленный характер влияния кислородсодержащих веществ на процессы сажеобразования может использоваться для выработки рекомендаций по внедрению биотоплив.

Достоверность полученных результатов и заключений обусловлена использованием современных экспериментальных средств диагностики и методов численного моделирования, методологией проведения эксперимента, воспроизводимостью полученных результатов и их согласием с проведенным численным моделированием и имеющимися литературными данными.

Личный вклад соискателя состоит в активном участии в постановке задачи, планировании исследований, проведении экспериментов и численного моделирования, обсуждении результатов и подготовке публикаций по теме диссертационной работы.

Апробация результатов исследования проводилась на 9 российских и международных конференциях и симпозиумах. Основные публикации по выполненной работе также подготовлены при определяющем участии автора.

В ходе защиты диссертации критических замечаний высказано не было.

Соискатель Коршунова М.Р. ответила на задаваемые ей в ходе заседания вопросы, согласилась с замечаниями и привела собственную аргументацию.

На заседании от 18.10.2023г. диссертационный совет постановил за решение научной задачи, имеющей значение для развития отрасли знаний о горении, в частности сажеобразования в присутствии кислородсодержащих биотоплив, присудить Коршуновой Майе Ручировне ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14 - теплофизика и теоретическая теплотехника.

При проведении тайного голосования Диссертационный совет в количестве 23 человека, из них очно: 5 докторов наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 6 докторов наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника, дистанционно: 5 доктора наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 6 докторов наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника, участвовавших в заседании, из 31 человека, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за 23, против 0, недействительных бюллетеней - 0.

Зам. председателя диссертационного совета 24.1.193.01
д.ф.-м.н., профессор

Ученый секретарь диссертационного совета 24.1.193.01
к.ф.-м.н.


Андреев Н.Е.
Тимофеев А.В.
18.10.2023 г.