

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 и 9 тезисов в сборниках трудов конференций:

1. A. Drakon, A. Eremin, M. Korshunova, E. Mikheyeva. РАН 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. Akhunyanov, 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 ускоряют 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 кислородсодержащих 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 докторов 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.