

О Т З Ы В

на автореферат диссертации ЯЦЕНКО Павла Ивановича
«Исследование термодинамических и кинетических свойств
йодсодержащих галогенуглеродов пропанового ряда»,
представляемой на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Одна из глобальных и актуальнейших проблем современной науки – предсказание первоочередных мероприятий по сокращению вредоносного воздействия на экосистему Земли, грозящего глобальным потеплением климата и будущему существованию человечества. Среди задач этой проблемы важной является задача об отказе от использования существующих хладонов на основе предельных углеводородов (метана, этана) с заменой атомов водорода на атомы фтора (хлора, брома). Такие хладоны разрушают озоновый слой Земли, защищающий планету от перегрева солнечной радиацией. Поиск новых эффективных и экологически безопасных заменителей существующих хладонов – актуальная и важная мировая тема, выбранная Соискателем для своей диссертации. Соискатель сосредоточил внимание на перспективных йодсодержащих соединениях йодтрифторметана CF_3I , изомеров йодгептафторпропана C_3F_7I и йодпропана C_3H_7I .

Соискатель защищает:

1. Результаты расчетов термодинамических свойств молекул $n-C_3F_7I$, $i-C_3F_7I$ и $n-C_3H_7I$, $i-C_3H_7I$, выполненные на основе квантово-химических вычислений.
2. Результаты экспериментальных измерений констант скоростей диссоциации молекул CF_3I , $n-C_3F_7I$ и $n-C_3H_7I$ в широком диапазоне температур при различном давлении.
3. Результаты теоретических расчетов констант скоростей диссоциации молекул CF_3I , $n-C_3F_7I$ и $n-C_3H_7I$, выполненные на основе модели РРКМ в широком диапазоне температур и давлений. Результаты расчета констант скоростей в пределе высоких, низких давлений и в переходной области по давлению.
4. Термохимические данные реакций диссоциации и изомеризации молекул C_3F_7I и C_3H_7I и величины расчетных констант равновесия процессов изомеризации реакций $n-C_3F_7I=i-C_3F_7I$ и $n-C_3H_7I=i-C_3H_7I$ при нормальных условиях.

Новизна полученных результатов подтверждается тем, что для этих соединений известны лишь некоторые физические характеристики, а термодинамические и кинетические данные об исходных и

промежуточных веществах практически не известны. Соискатель уделил этому большое внимание и добился успеха с использованием различных экспериментальных и расчетных исследований (атомная резонансная абсорбционная спектроскопия АРАС, квантовая химия, химическая и классическая термодинамика, кинетика химических реакций и ее описание...). Потому обоснованность и достоверность выводов не вызывает сомнения. Дополнительным аргументом в пользу Соискателя является тот факт, что данные по кинетике диссоциации CF₃I включены в Базу данных химической кинетики Национального института стандартов и технологий США (NIST).

Несмотря на краткость Автореферата о представленной работе создается впечатление добротной выполненной и оформленной работы и сложилось общее положительное мнение.

Материалы диссертационной работы достаточно полно опубликованы в научной печати (11 работ, в том числе 5 статей из списка ВАК), докладывались на отечественных и международных конференциях.

Считаю, что представленная работа «Исследования термодинамических и кинетических свойств йодсодержащих галогенуглеродов пропанового ряда» по совокупности результатов представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая по актуальности, уровню и глубине проработки, новизне полученных результатов, объему и четкости представления соответствует требованиям п.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», предъявляемым ВАК РФ к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор, ЯЦЕНКО Павел Иванович вполне заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14 – «Теплофизика и теоретическая теплотехника».

Главный научный сотрудник
Ин-та гидродинамики им. М.А.Лаврентьева СО РАН
доктор физико-математических наук, профессор

А.А.Васильев

Подпись Васильева А.А. заверяю
Ученый секретарь ИГиЛ СО РАН, к.ф.-м.н.

А.К.Хе

29.11.2021

