

РАСЧЕТ ПОВЕРХНОСТИ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ РЕАКЦИИ $C_5H_4O + H$ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИМИ AB INITIO МЕТОДАМИ

А. Р. Гильдина¹, А. М. Мебель², А. Д. Олейников³, П. А. Михеев⁴, В. Н. Аяззов⁵

Аннотация: Проведены расчеты поверхности потенциальной энергии реакции $C_5H_4O + H$, которая представляет собой важную стадию в окислении моноциклических и полициклических ароматических радикалов в системах горения. Их окисление предотвращает выработку полициклических ароматических углеводородов (ПАУ), которые являются источником сажи в системах сгорания топлива. Геометрии оптимизировались с использованием функционала плотности B3LYP, а энергии уточнялись на уровне CCSD(T)-F12. Результаты показали, что реакция идет присоединением H к циклопентадиенону с последующей изомеризацией и отрывом CO, дающем C_4H_5 изомеры. C_4H_5 впоследствии распадается на винулацетилен + H или винил + ацетилен. Рассчитаны энергии, образующиеся в результате этих реакций, и приведены возможные пути реакции.

Ключевые слова: системы сгорания; полициклические ароматические углеводороды; поверхность потенциальной энергии; метод функционала плотности; *ab initio* метод

Литература

1. Baird W. M. Carcinogenic polycyclic aromatic hydrocarbon-DNA adducts and mechanism of action // Environ. Mol. Mutagen., 2005. No. 45. P. 106–114.
2. Finlayson-Pitts B. J., Pitts J. N. Tropospheric air pollution: Ozone, airborne toxics, polycyclic aromatic hydrocarbons, and particles // Science, 1997. No. 276. P. 1045–1052.
3. Frenklach M. Reaction mechanism of soot formation in flames // Phys. Chem., 2002. No. 4. P. 2028002037.
4. Richter H., Howard J. B. Formation and consumption of single-ring aromatic hydrocarbons and their precursors in premixed acetylene, ethylene and benzene flames // Phys. Chem., 2002. No. 4. P. 2038–2055.

¹Самарский государственный аэрокосмический университет им. С. П. Королева, primitive23@yandex.ru

²Международный университет Флориды, США, mebela@fiu.edu

³Самарский государственный аэрокосмический университет им. С. П. Королева

⁴Самарский филиал Физического института имени П. Н. Лебедева Российской академии наук

⁵Самарский государственный аэрокосмический университет им. С. П. Королева, ayzazov@fian.smr.ru

5. *Parker D. S. N., Zhang F., Kim Y. S., Kaiser R. I., Landera A., Kislov V. V., Mebel A. M., Tielens A. G. G.* Low temperature formation of naphthalene and its role in the synthesis of PAHs (polycyclic aromatic hydrocarbons) in the interstellar medium // *M. Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 2012. No. 109. P. 53–58.
6. *Tokmakov I. V., Kim G.-S., Kislov V. V., Mebel A. M., Lin M. C.* The reaction of phenyl radical with molecular oxygen: A G₂M study of the potential energy surface // *J. Phys. Chem. A*, 2005. No. 109. P. 6114–6127.
7. *Parker D. S. N., Kaiser R. I., Troy T. P., Kostko O., Ahmed M., Mebel A. M.* Toward the oxidation of the phenyl radical and prevention of PAH formation in combustion systems // *J. Phys. Chem. A*, 2015. Vol. 119. No. 28. P. 7145–7154.
8. *Venkat C., Brezinsky K., Glassman I.* High temperature oxidation of aromatic hydrocarbons // *Symposium (International) on Combustion Proceedings*, 1982. Vol. 19. P. 143–152.

Поступила в редакцию 18.12.15