

## О Т З Ы В

на автореферат диссертации ОСИПОВОЙ КСЕНИИ НИКОЛАЕВНЫ «Кинетика и механизм химических реакций окисления и горения смесей аммиак/водород», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Диссертация Осиповой К.Н. посвящена актуальной проблеме химической физики – получению новых данных о кинетике химических реакций горючих систем аммиак–кислород–инертный аргон и этих же систем с дополнительным топливным компонентом – водородом. Существенной особенностью и новизной этих исследований является то, что данные о кинетике получены при повышенных давлениях системы (до 6 атм), а также в присутствии азота, который считается инертным вплоть до температур 3000 К. Для условий горения и взрыва мнение об инертности азота не согласуется с экспериментальным фактом регистрации азотных атомов в промежуточных радикалах (например, HCN в ацетилено–воздушном пламени), а также окислов азота (NO, NO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>...) в продуктах топливно–воздушных смесей. Поскольку окислы азота относятся к токсичным веществам, то выявление химических механизмов их образования является одной из важнейших задач и для экологии (с точки зрения снижения концентрации вредных выбросов за счет умения управлять ходом химических реакций).

Соискательницей экспериментально получены новые данные в смесях NH<sub>3</sub>/O<sub>2</sub>/Ar и NH<sub>3</sub>/H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/Ar о процессах окисления аммиака и водорода в изотермическом реакторе струйного перемешивания в условиях предпламенного горения, новые данные о скоростях распространения пламен в смесях NH<sub>3</sub>/H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> при P<sub>0</sub>=1 атм, а также данные о структурах пламен в смесях NH<sub>3</sub>/O<sub>2</sub>/Ar и NH<sub>3</sub>/H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/Ar при давлениях 1, 4 и 6 атм (в виде профилей концентраций).

Кроме экспериментальных исследований Соискательницей осуществлено численное тестирование полученного набора экспериментальных данных с помощью известных из литературы детальных механизмов окисления и горения аммиака. Дополнительно проанализировано влияние добавок водорода на процесс окисления аммиака, а также на образование оксидов азота в зоне химических реакций и в конечных продуктах горения. Установлено, что добавка 30% водорода снижает температуру начала интенсивного окисления аммиака на 250 К, а повышение давления от 1 до 6 атм и переход к смесям с 20% избытком топлива приводит к снижению концентрации NO и N<sub>2</sub>O в 2-10 раз.

Выявлены недостатки существующих механизмов окисления аммиака и сформулированы рекомендации по уточнению кинетических коэффициентов отдельных элементарных реакций. Анализ влияния добавок водорода на процесс окисления аммиака показал, что эффект добавки водорода оказывает намного более сильное влияние, чем изменение при этом начального состава смеси (и изменение соотношения топливо/окислитель).



Следует отметить, что экспериментальные данные по химической и тепловой структуре пламен в смеси из двух топливных компонент (аммиак/водород) при атмосферном и повышенных давлениях были получены впервые.

Достоверность полученных результатов обусловлена комплексным экспериментальным исследованием с использованием современного оборудования и приборов, воспроизводимостью экспериментальных данных, а также использованием современных методов численных расчетов.

4 публикации Соискателя в престижных международных журналах ("Fuel", "Combustion and Flame", "Internal Journal of Hydrogen Energy) свидетельствуют о высоком рейтинге проведенных исследований и достаточно полно отражают основные направления работы и достигнутые результаты исследований. Материалы диссертации были представлены на 6 отечественных и международных научных конференциях.

Несколько замечаний к автореферату:

1. на стр.11 реферата 5 последних строк являются дважды повторенными идентичными предложениями.

2. в работе используется коэффициент избытка топлива – дробь, в числителе которой стоит соотношение топлива и окислителя в данной смеси, а в знаменателе – такое же соотношение для смеси стехиометрического состава. Для однотопливных систем это хорошо известный параметр, где стехиометрия определяется по высшим окислам в продуктах. А как в случае двухтопливной смеси аммиак–водород определялось стехиометрическое соотношение и коэффициент избытка топлива? (В продуктах кроме  $H_2O$  возможны различные окислы азота – от  $N_2$  до  $N_2O_5$ ). К сожалению, в реферате этот вопрос не изложен.

3. Как соотносятся данные об оксидах азота после завершения реакции, полученные при расчетах с помощью схемы детальной кинетики, с данными равновесных расчетов?

Замечания не снижают общей положительной оценки представленной работы.

Тема диссертационной работы является частью проектов, выполненных при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-33-90163 «Исследование кинетики и механизма химических реакций окисления и горения топливных смесей аммиак/водород и муравьиная кислота/водород»), а также при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 075-15-2020-806 «Фундаментальные исследования процессов горения и детонации применительно к развитию основ энерготехнологий»).

Диссертационная работа ОСИПОВОЙ Ксении Николаевны «Кинетика и механизм химических реакций окисления и горения смесей аммиак/водород» является квалификационной научной работой, соответствует требованиям действующего Положения о порядке присуждения ученой степени кандидата наук. Автор работы ОСИПОВА Ксения Николаевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17



– химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Главный научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения Российской академии наук доктор физико-математических наук (старый шифр 01.04.17 – «Химическая физика, в том числе физика горения и взрыва»; новая классификация – 1.3.17 «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества»), профессор

Васильев Анатолий Александрович

« 02 » мая 2023 г.

Я, Васильев Анатолий Александрович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой диссертации ОСИПОВОЙ Ксении Николаевны, и их дальнейшую обработку.

Подпись А.А. Васильева заверяю

Ученый секретарь Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения Российской академии наук кандидат физико-математических наук



XE Александр Канчерович

02.05.2023 г.