

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ РЕАКЦИИ 1-БУТИНА И МЕТИЛИДИНОВОГО РАДИКАЛА

Николаев А.<sup>1,2</sup>, Аяззов В. Н.<sup>1,2</sup>, Мебель А. М.<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Самарский университет, г. Самара, Россия, [nikolayev\\_tolya57@inbox.ru](mailto:nikolayev_tolya57@inbox.ru)

<sup>2</sup>Филиал ФИАН, г. Самара, Россия

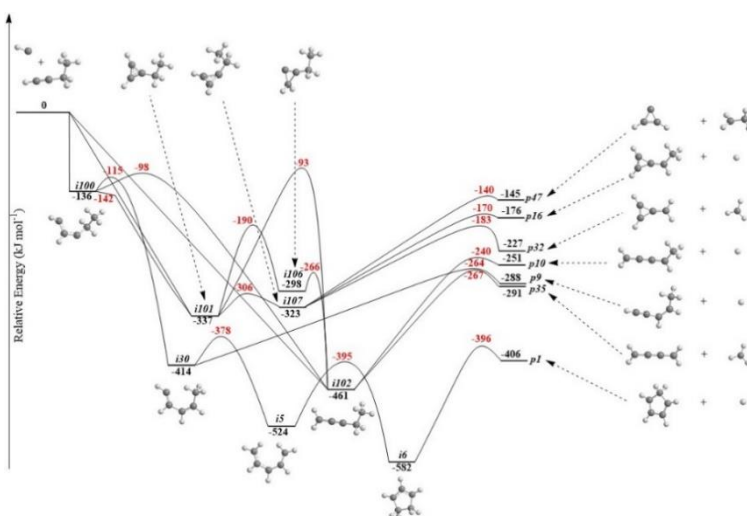
<sup>3</sup>Международный университет Флориды, г. Майами, Флорида, США

*Ключевые слова:* горение, поверхность потенциальной энергии, астрохимия, квантовая механика

Рассмотрена химическая реакция 1-бутина ( $C_4H_6$ ) с метилидиновым радикалом (CH). Исследуемая реакция протекает как в результате горения ископаемых видов топлив при высоких температурах [1], так и в холодных облаках открытого космоса при достаточно низких температурах [2]. 1-бутин является изомером молекул 1,3-бутадиена [3] и 1,2-бутадиена [4], задачи с которыми при реагировании с тем же метилидин-радикалом были уже изучены. Для двух данных реакций были проведены экспериментальные исследования со скрещенными молекулярными пучками изомеров  $C_4H_6$  и метилидина.

Целью данной работы является анализ механизмов образования пятичленных соединений в химической реакции 1-бутина с метилидином. Изучение механизмов образования ароматических пятичленных углеводородов  $C_5$  привлекло большое внимание научного сообщества в области физической и теоретической химии, физики и химии горения и взрыва, а также астрохимии ввиду важности углеводородов  $C_5$  в качестве потенциальных предшественников (прекурсоров) полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) в процессах горения и в космических условиях.

С помощью квантово-механических расчетов высокого уровня были найдены оптимальные геометрии для промежуточных комплексов, переходных состояний, продуктов реакции; колебательные частоты и значения потенциальных энергий. Геометрии различных соединений были оптимизированы с использованием гибридного метода функционала плотности wB97XD с базисным набором 6-311G\*\* в программе Gaussian09 [5]. Использование данного метода достаточно для получения точных расчетов геометрической структуры молекул. Для уточнения полученных методом wB97XD энергий был применен метод связанных кластеров CCSD(T)-F12 с корреляционно-согласованным базисным набором cc-pVTZ-F12 в программном пакете MOLPRO 2010 [6]. При использовании системы данных методов получают результаты, достигающие химической точности 4 кДж/моль.



Объединяя все полученные данные, можно построить поверхность потенциальной энергии (ППЭ), где все энергии промежуточных комплексов (промежуточных состояний или интермедиатов), переходных состояний и продуктов реакции были рассчитаны относительно энергии реагентов, принятой за начало отсчета. Основной единицей измерения для энергии является кДж/моль. Одна из частей ППЭ представлена рис. 1.

*Работа поддержана грантом №14.Y26.31.0020 Министерства образования и науки Российской Федерации.*

### Список литературы

1. Richter H. [et. al], Formation of polycyclic aromatic hydrocarbons and their growth to soot – a review of chemical reaction pathways // Prog. Energy Combust. Sci. 2000. V. 26. P. 565-608.
2. Marco d'Ischia [et. al], Astrochemistry and Astrobiology: Materials Science in Wonderland? // International Journal of Molecular Science. 2019. V. 20. P. 1-16.
3. He C. [et. al], Gas-phase synthesis of 3-vinylcyclopropene via the crossed beam reaction of the methylidyne radical ( $\text{CH}$ ;  $X^2\Pi$ ) with 1,3-butadiene ( $\text{CH}_2\text{CHCHCH}_2$ ;  $X^1A_g$ ) // ChemPhysChem. 2020. V. 21. P. 1-16.
4. He C. [et. al], Gas-phase formation of  $\text{C}_5\text{H}_6$  isomers via the crossed molecular beam reaction of the methylidyne radical ( $\text{CH}$ ;  $X^2\Pi$ ) with 1,2-butadiene ( $\text{CH}_3\text{CHCCH}_2$ ;  $X^1A'$ ) // J. Phys. Chem. 2021. V. 125. P. 126-138.
5. Frisch M.J. [et. al], Gaussian 09, revision B.01 // Gaussian Inc.: Wallingford. CT. 2010.
6. Werner H.-J. [et. al], MOLPRO, version 2010.1, a package of ab initio programs // URL: <http://www.molpro.net>, 2015.

### Сведения об авторах

Николаев Анатолий, студент-магистрант Самарского университета, лаборант-исследователь НИЛ-101. Область научных интересов: химия горения, астрохимия, химическая физика.

Аязов Валерий Николаевич, главный научный сотрудник НИЛ-101. Область научных интересов: химия горения, астрономия, химическая инженерия, материаловедение.

Мебель Александр Моисеевич, ведущий ученый НИЛ-101. Область научных интересов: химия горения, химическая инженерия, материаловедение, генетическая и молекулярная биология, биохимия, медицина.

## THE STUDY OF THE POTENTIAL ENERGY SURFACE OF THE REACTION BETWEEN 1-BUTYNE AND THE METHYLIDYNE RADICAL

Nikolayev A.<sup>1,2</sup>, Azyazov V.N.<sup>1,2</sup>, Mebel A.M.<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Samara National Research University, Samara, Russia, [nikolayev\\_tolya57@inbox.ru](mailto:nikolayev_tolya57@inbox.ru)

<sup>2</sup>Physical Institute named after P.N. Lebedeva, Samara, Russia

<sup>3</sup>Florida International University, Miami, Florida, USA

*Keywords: potential energy surface, astrochemistry, quantum mechanics*

The 1-butyne+methylidyne reaction is investigated. The reaction is of the importance in combustion physics and chemistry at high temperatures and in astrochemistry at low temperatures. The study of formation mechanisms of five-membered aromatic  $\text{C}_5$  hydrocarbons has an important role in physical and theoretical chemistry since the hydrocarbons is potential precursors of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) in combustion and in space conditions.