

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИНДЕНИЛА И ИНДЕНИЛА

Красноухов В.С.<sup>1</sup>, Загидуллин М.В.<sup>1,3</sup>, Мебель А.М.<sup>1,2</sup><sup>1</sup>Самарский университет, Самара, Россия<sup>2</sup>Международный университет Флориды, Майами, США<sup>3</sup>Самарский филиал ФИАН, Самара, Россия,

email: vladya11@gmail.com

*Ключевые слова: инденил, горение, сажа, неэмпирические расчеты.*

В данном исследовании реакции радикалов на первом этапе рассчитываются энергии, оптимизированные структуры реагентов, промежуточных и переходных комплексов и продуктов взаимодействия инденила и инденила (C<sub>9</sub>H<sub>7</sub>) с использованием неэмпирического квантово-механического метода теории функционала плотности B3LYP/6-311G(d,p). Колебательные частоты и энергии нулевых колебаний E(ZPE) вычислялись аналогичным методом. Далее энергии реагентов, комплексов и продуктов уточнялись методом связанных-кластеров с аналогичным базисом CCSD(T)/6-311G(d,p), а также был произведен поиск энергетической поправки методом Меллера-Плессета MP2 с базисами G3Large и 6-311G(d,p). В дальнейшем полная энергия была получена на основе модифицированной комбинированной схемы E[G3] = E[CCSD(T)/6-311G(d,p)] + E[MP2/G3Large] – E[MP2/6-311G(d,p)] + E(ZPE), включающей расчетные методы высокого уровня. В результате данной работы показано, что образуются продукты C<sub>18</sub>H<sub>14</sub> при реакции двух двухциклических инденилов могут образоваться несколько соединений из класса ароматических углеводородов (ПАУ). Результаты данной работы важны для понимания механизмов роста ПАУ и прекурсоров частиц сажи в условиях горения углеводородного топлива.

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

**Сведения об авторах:**

Красноухов Владислав Сергеевич – аспирант 3 курса Самарского Университета по направлению «Теоретическая физика»;

Загидуллин Марсель Вакифович – д. ф.-м. н., профессор, ведущий научный сотрудник НИЛ-101 Самарского Университета;

Мебель Александр Моисеевич – д. ф.-м. н., профессор, главный научный сотрудник НИЛ-101 Самарского Университета.

## INDENYL AND INDENYL REACTION STUDY

V.S. Krasnoukhov<sup>1</sup>, M.V. Zagidullin<sup>1,3</sup>, A.M. Mebel<sup>1,2</sup><sup>1</sup>Samara University Samara, Russia<sup>2</sup>Florida International University, Miami, USA<sup>3</sup>Samara Branch of LPI, Samara,

Email:vladya11@gmail.com

*Keywords: Indenyl, combustion, soot, ab initio calculations.*

In this study of the of radicals' reaction the energies, the optimized structures of the reagents, intermediate and transition complexes and the products of the interaction of indenyl and indenyl (C<sub>9</sub>H<sub>7</sub>) are calculated using the ab initio quantum mechanical method.