УДК 544.4

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЁТ МЕХАНИЗМОВ ОБРАЗОВАНИЯ АНТРАЦЕНА И ФЕНАНТРЕНА ИЗ НАФТАЛИНА

Мебель А.М., Самарский университет, г. Самара, mebela@fiu.edu
Евсеев М.М., Самарский университет, г. Самара, mihail.evseev.2011@mail.ru

Ключевые слова: фенантрен, антрацен, 1-нафтил, 2-нафтил, ПАУ, поверхность потенциальной энергии

Полициклические ароматические углеводороды (ПАУ) и сажа, образующиеся в процессах горения при недостатке окислителя, представляют собой вредные побочные продукты, опасные для человека и экосистемы. Поэтому выявление детальных механизмов образования данных соединений от элементарных химических реакций, инициирующих и распространяющих рост ПАУ на молекулярном уровне до последовательного зарождения частиц сажи, коагуляции частиц и роста их поверхности, является важной целью исследования. Механизм генерации и развития ПАУ крайне сложный, с большим количеством возможных реакций, возникающих из-за большого разнообразия соединений, которые присутствуют в разных изомерных формах. Возникающие реакции происходят на сложных поверхностях потенциальной энергии, и их механизмы, скорости и выходы продукта могут сильно зависеть от условий, при которых они происходят. Основной задачей для понимания схемы эволюции ПАУ является исследование процесса возникновения в ПАУ дополнительного кольца.

В работе [1] был подробно исследован механизм возникновения нафталина и индена из бензола. Таким образом вопрос о расширении ПАУ с 1 до 2 колец можно считать решённым. Нам представляется интересным исследовать акт элементарного расширения ПАУ от 2 до 3 колец, ведь увеличение размеров системы могло привести к возникновению новых каналов реакций, приводящих к развитию ПАУ. В качестве прототипа данной стадии эволюции ПАУ можно рассматривать получение фенантрена и антрацена посредством реакции винилацетилена C_4H_4 с радикалами 1-нафтилом и 2-нафтилом.

В ходе работы были выявлены основные и второстепенные каналы реакций, для них была проведена оптимизация локальных минимумов и переходных состояний, были рассчитаны G3-энергии состояний и построена диаграмма потенциальной энергии реакции (рис.1). Было выявлено, что помимо реакций, приводящих к развитию ПАУ, на данной стадии су-

ществуют конкурирующие с ними реакции, не приводящие к генерации дополнительного кольца.

В работе были задействованы такие программные средства, как Gaussian 09 и Molpro. В программном пакете Gaussian проводилась оптимизация состояний, расчёт энергий и частот с использованием метода B3LYP и базиса 6-311G**. Уточнение энергий проводилось в программном пакете Molpro методом CCSD(T) с задействованием базиса 6-311G**.

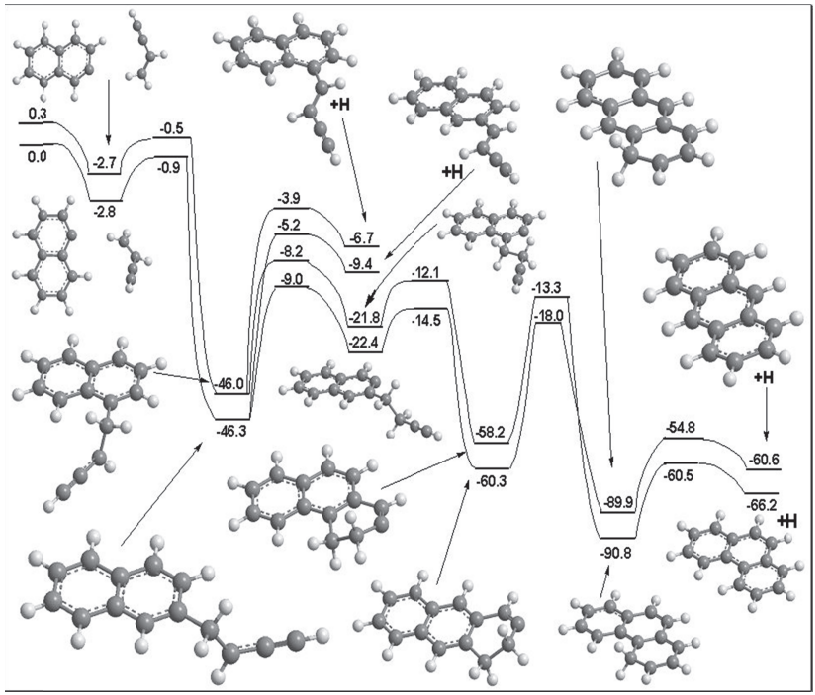

Рис. 1. Диаграмма потенциальной энергии для реакции $C_{10}H_7+C_4H_4$

Список литературы

1. *Mebel, A.M., Landera, A., Kaiser, R.I.* Formation Mechanisms of Naphthalene and Indene From the Interstellar Medium to Combustion Flames // J. Phys. Chem. A. 2017, 121(5), 901-926.