

наиболее вероятными промежуточными состояниями данной реакции являются W3-1 и W1. Выход бензофульвалена становится также существенным в условиях высоких температур.

Список литературы

1. Westmoreland, P. R., Dean, A. M., Howard, J. B., and Longwell, J. P., J. Phys. Chem., 1989, 93, pp. 8171–8180.
2. Kislov, V. V. and Mebel, A. M., J. Phys. Chem. A, 2007, 111, pp. 9532-9543.
3. Mebel, A. M., Landera, A., Kaiser, R.I., J. Phys. Chem. A, 2017, 121 (5), pp 901–926.

УДК 621.45

РАСЧЕТ СПЕКТРА ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ МОЛЕКУЛ ОН В МЕТОДЕ LIF-ДИАГНОСТИКИ МЕТАНО-ВОЗДУШНОГО ПЛАМЕНИ КАЛИБРОВОЧНОЙ ГОРЕЛКИ

Болычев С.А., Диденко А.А., Ломова Ю.В.
Самарский университет, г. Самара

Работа посвящена исследованию пламени методом лазерно-индуцированной флуоресценции. Метод лазерно-индуцированной флуоресценции является одним из наиболее популярных лазерно-оптических методов, позволяющим проводить измерения распределения концентрации промежуточных продуктов реакции горения (ОН, NO, CO и др.) с высоким пространственным и временным разрешением, без оказания прямого влияния на исследуемый объект. Метод лазерно-индуцированной флуоресценции радикалов ОН применяется для определения распределения концентрации ОН в пламени, а также положения фронта пламени.

Экспериментальная часть работы проводилась на лазерной установке Flame Master (LaVision, Германия) с использованием калибровочной горелки McKenna. Излучение твердотельного лазера используется для накачки перестраиваемого лазера на красителях, дающего излучение после преобразователя частоты в диапазоне 260–287 нм. Далее излучение через систему призм направляется в коллимирующую оптическую систему, преобразующую лазерный луч в «лазерный нож», который проходит через ось симметрии исследуемого пламени и возбуждает радикалы ОН, присутствующие в пламени. Регистрация флуоресценции ОН осуществляется с помощью камеры с усилителем изображения.

Поскольку точность настройки лазера на красителях на определенную длину волны составляет около 30 пм, а ширина перехода двухатомных молекул порядка нескольких пикометров, то необходимо провести сканирование спектра возбуждения исследуемого компонента в определенном диапазоне длин волн с шагом 1–5 пм для выявления отдельных переходов. Было проведено сканирование спектра возбуждения ОН в диапазоне 283.4–283.7 нм с шагом 1 пм. Для правильной интерпретации полученного экспериментального спектра, необходимо провести расчет теоретического спектра возбуждения радикала ОН для заданного диапазона излучения. В рамках теоретических исследований разработана программа расчета спектра колебательно-вращательной полосы (1,0) электронного перехода $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$ радикала ОН, позволяющая рассчитывать положение линий в спектре с погрешностью 0.4 см^{-1} (0.03%) и интенсивность линий – 10%. Проведено сопоставление рассчитанного и экспериментального спектров возбуждения ОН.

УДК 544.18

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА РЕАКЦИИ АЦЕНАФТИЛЕНА С НАФТАЛИНОМ

Семенихин А.С., Савченкова А.С., Чечет И.В., Матвеев С.Г.

Самарский университет, г. Самара, air.booklet@gmail.ru

Мебель А.М., Florida International University, Miami, mebela@fiu.edu

Ключевые слова: квантово-химический расчет, механизм нуклеации, выбросы вредных веществ, сажа

Продукты неполного сгорания топлива содержат в своем составе аэрозольные частицы сажи, которые могут оказывать значительное влияние на климат, чистоту окружающего воздуха и здоровье человека. Ключевую роль в механизмах образования сажи, имеет нуклеация распространенных в пламени ароматических соединений из нескольких колец. Таким образом, изучение различных механизмов образования сажи и снижение уровня эмиссии частиц сажи актуальная экологическая и инженерная задача.

В данной работе современными методами квантовой химии были исследованы два механизма нуклеации с образованием ковалентной связи между