

Для реагентов, промежуточных стадий, переходных состояний и продуктов в программном пакете Gaussian 09 рассчитывается оптимизированная геометрия, составляется поверхность потенциальной энергии и рассчитываются колебательные частоты методом теории функционала плотности (DFT) B3LYP с набором базисных функций 6-311G(d,p) или гибридным методом ω B97XD с базисом cc-pVTZ. Для уточнения значений поверхности потенциальной энергии, в программном пакете MOLPRO 2010 проводятся уточняющие расчёты комбинированным *ab initio* методом G3(MP2,CC), точность которого для исследуемых структур сопоставима с экспериментальной. Полученные энергетические и молекулярные параметры используются для решения главного кинетического уравнения Райса-Рамспергера-Касселя-Маркуса (RRKM-ME) с целью вычисления скоростей реакций для различных давлений и температур. Полученные значения скоростей представлены в виде параметров модифицированного уравнения Аррениуса для расширения существующих механизмов горения.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-38-90241).

Сведения об авторах

Семенихин Александр Сергеевич, аспирант кафедры Теплотехники и тепловых двигателей. Область научных интересов: кинетическое моделирование процессов горения.

Савченкова Анна Сергеевна, к.х.н., научный сотрудник. Область научных интересов: физика и химия процессов горения.

Чечет Иван Викторович, канд. техн. наук, старший научный сотрудник. Область научных интересов: физика и химия процессов горения.

Матвеев Сергей Геннадьевич, канд. техн. наук, ведущий научный сотрудник. Область научных интересов: процессы горения в газотурбинных двигателях.

Лукачев Сергей Викторович, д-р техн. наук, профессор кафедры Теплотехники и тепловых двигателей. Область научных интересов: процессы горения в газотурбинных и поршневых двигателях.

Мебель Александр Моисеевич, к.х.н., ведущий научный сотрудник. Область научных интересов: физика и химия процессов горения.

OXIDATION REACTIONS OF PARA-XYLENE: A THEORETICAL STUDY

Semenikhin A.S.¹, Savchenkova A.S.¹, Chechet I.V.¹, Matveev S.G.¹,
Lykachev S.V.¹, Mebel A.M.^{1,2}

¹Samara National Research University, Samara, Russia, semenikhin.as@ssau.ru

²Florida International University (FIU), Miami

Keywords: para-xylene, quantum chemistry, rates of chemical reactions

The aim of this work is a theoretical study of the oxidation of para-xylene. The work shows the reactions of existing models and developed a new sub-mechanism, with the reaction rates calculated by methods of computer chemistry.