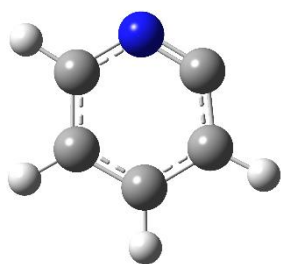


## ОКИСЛЕНИЕ ПАРА-ПИРИДИЛА МОЛЕКУЛЯРНЫМ КИСЛОРОДОМ: ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

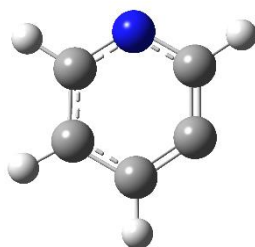
Савченкова А.С., Голенко А.М., Семенихин А.С., Матвеев С.С., Матвеев С.Г., Литарова А.А., Анисимов В.М., Бобкова Д.Р., Чечет И.В., Мебель А.М.  
Самарский университет, г. Самара, [paramonovaanna@mail.ru](mailto:paramonovaanna@mail.ru)

*Ключевые слова:* пара-пиридил, поверхность потенциальной энергии, модель сгорания угля.

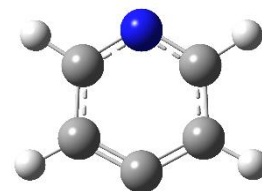
Удобной модельной системой для изучения горения угля является молекула пиридина, имеющая с одной стороны ароматическую природу, а с другой содержащая в своем составе атом азота. В процессе окисления пиридин может превращаться в три радикала: орто-пиридил, пара-пиридил и мета-пиридил, различающихся положением радикала относительно атома азота (рис. 1).



орто-пиридил



мета-пиридил



пара-пиридил

Рисунок 1 – Радикалы пиридина

В настоящее время наиболее изученными являются процессы окисления орто-пиридила в связи с его несколько большей стабильностью по сравнению с другими радикалами. Однако полное описание процесса горения таких молекул, как пиридин, невозможно без подробного изучения процесса окисления всех его радикалов. Нами было изучено окисление пара-пиридила молекулярным кислородом квантово-химическими методами в рамках теории функционала плотности. По результатам проведенного исследования были определены основные пути и продукты взаимодействия пара-пиридила с молекулярным кислородом, а также построена поверхность потенциальной энергии (ППЭ) данного взаимодействия. Кроме того, было проведено сравнение данной поверхности потенциальной энергии с полученной ранее для взаимодействия орто-пиридила с  $O_2$ .

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-73-00277, <https://rscf.ru/project/22-73-00277/>

### Сведения об авторах

Савченкова А.С., к.х.н., доцент кафедры неорганической химии, с.н.с. НОЦ ГДИ-209 Самарского университета. Область научных интересов: определение путей и констант скоростей индивидуальных реакций квантово-химическими методами, исследование процессов окисления индивидуальных компонентов органических топлив.

Голенко Андрей Михайлович — студент 3 курса химического факультета Самарского университета. Научные интересы: квантово-химический расчет путей индивидуальных реакций.

Семенихин А.С., к.т.н., с.н.с. НОЦ ГДИ-209 Самарского университета. Область научных интересов: кинетическое моделирование процессов горения.

Матвеев С.С., к.т.н., старший преподаватель кафедры теплотехники и тепловых двигателей, с.н.с. НОЦ ГДИ-209 Самарского университета. Область научных интересов: образование и выброс загрязняющих веществ при сжигании углеводородных топлив,

применение метано-водородных смесей и водорода в камерах сгорания газотурбинных установок.

Матвеев С.Г., к.т.н., доцент, профессор кафедры теплотехники и тепловых двигателей, в.н.с. НОЦ ГДИ-209 Самарского университета. Область научных интересов: экспериментальные исследования и моделирование процессов горения применительно к камерам сгорания ГТД и ГТУ, образование и выброс загрязняющих веществ при сжигании углеводородных топлив, применение метано-водородных смесей и водорода в камерах сгорания газотурбинных установок.

Литарова А.А., магистрант, лаборант-исследователь НОЦ ГДИ-209 Самарского университета. Область научных интересов: моделирование процессов в камерах сгорания ГТД и ГТУ.

Анисимов В.М., ассистент кафедры теплотехники и тепловых двигателей, н.с. НОЦ ГДИ-209 Самарского университета. Область научных интересов: газодинамические расчёты рабочего процесса камер сгорания ГТД.

Бобкова Д.Р., магистрант, лаборант-исследователь НОЦ ГДИ-209 Самарского университета. Область научных интересов: рабочие процессы в КС ГТД.

Чечет И.В., к.т.н., доцент кафедры теплотехники и тепловых двигателей, с.н.с. НОЦ ГДИ-209 Самарского университета. Область научных интересов: физика и химия процессов горения.

Мебель А.М., к.х.н., в.н.с. НОЦ ГДИ-209 Самарского университета. Область научных интересов: теоретическое и экспериментальное изучение процессов горения в двигателях, квантово-химический расчет путей и констант скоростей реакций окисления индивидуальных компонентов углеводородных топлив.

## **OXIDATION OF PARA-PYRIDYL BY MOLECULAR OXYGEN: A THEORETICAL STUDY**

Savchenkova A.S., Golenko A.M., Semenikhin A.S., Matveev S.S., Matveev S.G., Litarova A.A., Anisimov V.M., Bobkova D.R., Chechet I.V., Mebel A.M.  
Samara University, Samara, Russia, [paramonovaanna@mail.ru](mailto:paramonovaanna@mail.ru)

*Keywords: para-pyridyl, PES, coal combustion model.*

The oxidation of para-pyridyl with O<sub>2</sub> by quantum-chemical methods was studied. The main paths and products of this reaction were determined, and the PES of this interaction was constructed.

The work was supported by the grant from the Russian Science Foundation No. 22-73-00277, <https://rscf.ru/project/22-73-00277/>.