

## ПОВЕРХНОСТЬ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ ЭТИЛОВОГО РАДИКАЛА С МОНООКСИДОМ УГЛЕРОДА

Кузнецов О.В., Евсеев М.М.

Самарский филиал Физического института им. П.Н. Лебедева РАН, г. Самара,  
[kuznetsovov.lab@gmail.com](mailto:kuznetsovov.lab@gmail.com)

*Ключевые слова:* монооксид углерода, этиловый радикал, квантовая химия, сложные органические молекулы.

В пламени горения углеводородов в большом количестве присутствуют молекулы монооксида углерода и этиловые радикалы, которые могут формироваться в различных реакциях [1]. Реакции радикалов с кислородсодержащими молекулами в пламени может вносить существенный вклад в химическое разнообразие продуктов, в том числе, таких как спирты, альдегиды, кетоны и другие [2]. Подробные исследования реакций этилового радикала с окислителями O, O<sub>2</sub>, OH и HO<sub>2</sub> проводились во многих работах [3], тогда как реакция этилового радикала с монооксидом углерода изучалась не так тщательно.

В настоящей работе приведены результаты исследований реакции монооксида углерода CO с этиловым радикалом C<sub>2</sub>H<sub>5</sub> в условиях горения с использованием современных методов квантовой химии. Молекулярные параметры реагентов, продуктов, локальных минимумов и переходных состояний были оптимизированы на уровне теории функционала плотности B3LYP/6-311G(d,p). Уточнение относительных электронных энергий производилось методом связанных кластеров CCSD(T) с базисным набором Даннинга cc-pVTZ. Данный подход позволил достичь химической точности по относительным энергиям на уровне 1 кКал/моль.

Для проведения *ab initio* расчётов электронной структуры использовались программные пакеты GAUSSIAN 09 и MOLPRO 2015.

В рамках настоящей работы был построен профиль поверхности потенциальной энергии (рис. 1) для реакции этилового радикала с оксидом углерода (II). Проведенные расчеты показывают, что доминирующими продуктами, будут являться продукты p2 и p7. Также методом RRKM ME были рассчитаны константы скоростей реакции в диапазоне температур 300-2500 К.

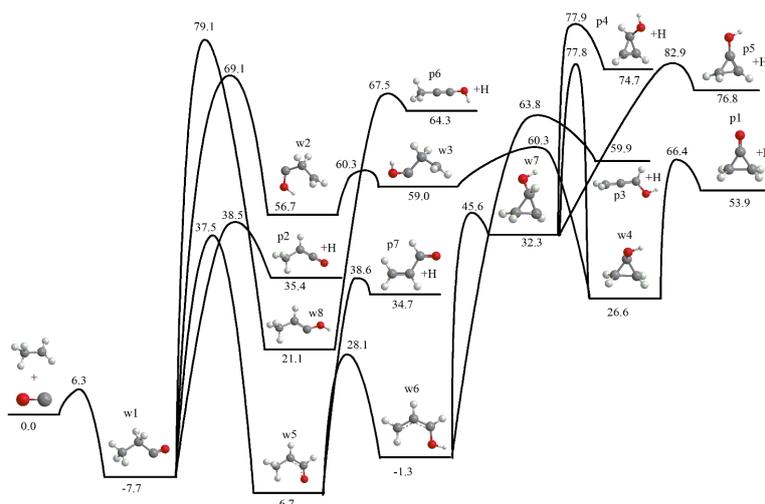


Рисунок 1 – Поверхность потенциальной энергии реакции этилового радикала с CO

### Список литературы

1. Klippenstein, S. J. (2017). From theoretical reaction dynamics to chemical modeling of combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 36(1), 77-111.
2. Zervas, E. *Environ Eng Sci* Formation of oxygenated compounds (aldehydes, alcohols, organic acids) from propane flames, 2005, 22, 651–659.

3. Harding, L. B., Klippenstein, S. J., & Georgievskii, Y. (2005). Reactions of oxygen atoms with hydrocarbon radicals: a priori kinetic predictions for the  $\text{CH}_3 + \text{O}$ ,  $\text{C}_2\text{H}_5 + \text{O}$ , and  $\text{C}_2\text{H}_3 + \text{O}$  reactions. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1), 985-993.

#### **Сведения об авторах**

Кузнецов О.В., аспирант. Область научных интересов: Химия горения, полициклические ароматические углеводороды, квантовая химия.

Евсеев М.М., аспирант. Область научных интересов: Квантовая химия, горение, кинетика, механизм HABA, полициклические ароматические углеводороды.

### **POTENTIAL ENERGY SURFACE OF THE REACTION OF ETHYL RADICAL WITH CARBON MONOXIDE**

Kuznetsov O. V., Evseev M. M.

Samara Branch of P.N. Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Samara, Russia, [kuznetsovov.lab@gmail.com](mailto:kuznetsovov.lab@gmail.com)

*Keywords: carbon monoxide, ethyl radical, quantum chemistry, potential energy surface.*

The pathways for the formation of  $\text{C}_3\text{H}_4\text{O}$  isomers in the  $\text{C}_2\text{H}_5 + \text{CO}$  reaction on the potential energy surface (PES) were found using ab initio quantum-chemical methods CCSD(T)-F12/cc-pVTZ-F12//B3LYP/6-311G(d,p). The found geometries, frequencies and relative energies of the compounds were used to determine the reaction rate constants in the RRKM approach with master equation. Six reaction pathways leading to various  $\text{C}_3\text{H}_4\text{O}$  isomers were found, among which methylketene and acrolein are the most probable under combustion conditions.