**Особенности взаимодействия *п*-пиридила с молекулярным кислородом**

***Голенко А.М.***

*Студент, 5 курс специалитета*

*Самарский Национальный Исследовательский Университет, Самара, Россия*

*E-mail:* [*andry.golenko2003@yandex.ru*](mailto:andry.golenko2003@yandex.ru)

Несмотря на развитие зеленой энергетики и проведение исследований по созданию экологически чистых топлив, в настоящее время многие промышленные предприятия продолжают использовать уголь. Связано это в первую очередь с доступностью и относительной дешевизной данного вида топлива.

Пиридин можно рассматривать как модельную систему при описании процессов горения угля, так как с одной стороны это ароматическая молекула, а с другой наличие атома азота даёт поправку на связанный азот в угле.

Пиридин способен образовывать три радикала: орто-, мета- и пара-пиридилы. Для детального понимания процесса горения пиридина важно изучить кинетические модели взаимодействия с молекулярным кислородом для каждого из радикалов.

Теоретические, в частности квантово-химические, методы позволяют уменьшить стоимость дорогостоящих экспериментов, а также получить результаты для процессов, которые затруднительно реализовать практически.

Данная работа посвящена теоретическому изучению путей реакции между пара-пиридилом и молекулярным кислородом, в ходе которой была построена поверхность потенциальной энергии взаимодействия пара-пиридила с молекулярным кислородом, а также были рассчитаны значения констант скоростей прямых и обратных реакций образования интермедиатов и конечных продуктов, и на основе анализа полученных значений были определены наиболее вероятные продукты.

Геометрии реагентов, продуктов и переходных состояний реакции были оптимизированы на уровне теории функционала плотности методом *ω*B97XD с базисным набором 6-311G\*\*. Частоты колебаний были рассчитаны на том же уровне теории, чтобы охарактеризовать стационарные точки как локальные минимумы или переходные состояния, а также чтобы получить поправки на энергию нулевых колебаний (ZPE) для использования в расчетах статистической суммы. Помимо этого, оптимизированная геометрия *ω*B97XD использовалась для уточнения одноточечных энергий с использованием комбинированного метода ab initio G3(MP2,CC).

Зависящие от температуры константы скоростей рассматриваемых реакций оценивались в рамках теории RRKM в сочетании с подходом Master Equation (RRKM-ME) в диапазоне температур 300 - 3000 К с использованием программного пакета Mess.

*Благодарности: автор выражает благодарность своему научному руководителю к.х.н. Савченковой Анне Сергеевне за ценные советы при планировании исследования и рекомендации по оформлению работы, проф. Коннову Александру Анатольевичу, проф. Мебель Александру Моисеевичу за помощь в выборе оптимальных методов исследования.*