

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Горн Маргариты Викторовны**
«Высокоточные квантовохимические расчеты кинетики и механизма первичных процессов термического разложения энергетических гетероциклических соединений», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Исследования Горн М.В. находятся в русле одного из важных направлений, посвященного изучению кинетики и механизмов термического разложения энергоемких веществ из класса полиазотных гетероциклов. Такого рода исследования чрезвычайно востребованы в химической физике и современном материаловедении для более глубокого понимания возможных трансформаций высокоэнергетических материалов, область применения которых чрезвычайно обширна. Стоит также отметить, что разработка методов синтеза и определение физико-химических свойств энергоемких структур на основе полиазотных гетероциклов проводятся уже не одно десятилетие, однако исследование их термического разложения и механизмов трансформации при горении сравнительно мало изучено.

В ходе проведенных исследований Горн М.В. детально изучила процессы термического разложения ряда полиазотных энергоемких структур, установила ключевые кинетические параметры и доминирующие первичные каналы термического разложения веществ. В качестве объектов исследования были выбраны некоторые перспективные гетероциклические структуры (1,5-диаминотетразол, 3,5-динитропиразол, 5-амино-3,4-динитропиразол, а также бигетероциклические производные тетразола и триазола), которые рассматриваются в качестве возможных компонентов различных энергоемких составов. Существенным достоинством работы является использование набора современных теоретических и экспериментальных методов, включающих высокоуровневые методы квантовой химии и термического анализа (дифференциальная сканирующая калориметрия и термогравиметрический анализ). В ряде случаев Горн М.В. успешно обнаружила новые каналы разложения: в частности, на примере термического разложения 3,5-динитропиразола был найден новый канал разложения, основанный на [1,5]-сигматропном переносе атома водорода, энтальпия активации которого на 2 ккал/моль ниже, чем у нитро-нитритной перегруппировки, ранее априори считавшаяся очевидным первичным процессом термического разложения. Стоит также отметить, что Горн М.В. применила полный комплекс теоретических и экспериментальных методов для всех выбранных энергоемких гетероциклических структур, что свидетельствует о логичности, стройности и завершенности данной научно-квалификационной работы.

Автореферат написан хорошим языком, практически не содержит опечаток или неточностей, построен логично и последовательно. В ходе чтения автореферата возникли следующие вопросы и замечания:

1. Для более удобного понимания сути работы следовало бы во введении к автореферату изобразить молекулярные структуры всех исследованных в работе энергоемких гетероциклических соединений.
2. Стр. 8, п. 4 положений, выносимых на защиту: следует четко указывать расположение заместителей в пиразольном цикле и писать «5-амино-3,4-динитропиразол» вместо «5-аминодинитропиразол».
3. В предложении «Реакция раскрытия тетразольного цикла с последующим отрывом молекулярного азота...», по-видимому, имеется ввиду реакция раскрытия 1,2,3-триазольного цикла (стр. 12 автореферата).

Вышеприведенные замечания ни в коем случае не влияют на общее хорошее впечатление о работе и на высокую оценку проведенных исследований. Материал автореферата в полной мере отражен в 4 научных статьях, опубликованных в ведущих отечественных и зарубежных журналах, входящих в базы данных Web of Science и Scopus, а также апробирован на 10 российских и международных научных конференциях.

Таким образом, рассматриваемая диссертационная работа по поставленным задачам, уровню их решения и новизне полученных результатов соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, в том числе отвечает критериям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 (в действующей редакции), а ее автор – Горн Маргарита Викторовна, безусловно, заслуживает присуждения ей искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Доктор химических наук

специальность 02.00.03 – Органическая химия

Заведующий лабораторией азотсодержащих соединений №19

Федерального государственного бюджетного учреждения науки

Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук

119991, г. Москва, Ленинский пр., 47

Тел.: +7 499 135 53 26

E-mail: fershtat@ioc.ac.ru

Ферштат Леонид Леонидович

Согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку

Подпись д.х.н. Ферштата Л.Л. заверяю:

Заместитель директора ИОХ им. Н.Д. Зелинского РАН

д.х.н., член-корр. РАН

10.01.2023



Дильман Александр Давидович