

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации М. В. Горн «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

Диссертация М.В. Горн посвящена механизму термического разложения ряда гетероциклических соединений. Исследованы следующие классы веществ: тетразолы, триазолы, пиразолы. Производные таких гетероциклов являются эффективными энергоемкими соединениями. Тема работы актуальна. Работа содержит как теоретическую, так и экспериментальную части. При этом основное внимание уделено теоретическому исследованию. Эта часть и является наиболее значимой.

Автор использовала наиболее эффективные в настоящее время методы квантово-химических расчетов, что предопределило надежность полученных результатов. В итоге М.В. Горн удалось получить целый ряд интересных научных результатов. В частности, было показано, что распад диаминотетразола осуществляется через дециклизацию аминной формы с последующим отщеплением молекулярного азота. При исследовании термического разложения бис-производных тетразола и триазола надежно установлено, что реакция протекает в две стадии – дециклизацию и элиминирование. Для нитропиразолов были обнаружены новые реакции их разложения, установлен детальный механизм распада.

К представленному тексту имеются некоторые замечания:

1. Мне так и не удалось понять, каким образом при расчете активационных параметров рассчитывались предэкспоненциальные множители. Ведь эти величины имеют энтропийную составляющие (энтропия активации), а в автореферате говорится только об энпальпиях.
2. То же касается вопроса о механизме автокатализа при термическом разложении 5-амино-3,4-динитропиразола. Быть может, автору стоило привести стехиометрическую схему реакции и четко указать частицу, являющуюся автокатализатором. Возможно, высказанные замечания обусловлены вынужденной краткостью изложения в автореферате, и все это есть в подробном тексте диссертации.

3. Мне кажется, что М.В. Горн не следовало бы акцентировать внимание на высокой энтальпийности изученных веществ как факторе, определяющем их энергоёмкость. Напомню, что энтальпия образования нитроглицерина равна -88,40 ккал/моль, а энтальпия образования ТЭНа - вообще -127,20 ккал/моль, а ведь это очень мощные ВВ.

Высказанные замечания не являются существенными. В целом работа производит очень благоприятное впечатление. Автору удалось существенно продвинуться в понимании механизма термического разложения ряда энергоёмких гетероциклических соединений. Впрочем, самими этими веществами значимость полученных результатов не исчерпывается. Разработанные автором расчетные схемы могут быть полезны при изучении и других энергоёмких соединений.

На основании вышеизложенного я считаю, что диссертационная работа «Высокоточные квантовохимические расчеты кинетики и механизма термического разложения энергетических гетероциклических соединений» полностью соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, в том числе отвечает критериям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. (в действующей редакции), а ее автор, Горн Маргарита Викторовна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Борис Львович Корсунский
Доктор химических наук, профессор
специальность 01.04.17 – химическая физика горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества
главный научный сотрудник лаборатории термодинамики высокоэнергетических систем Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН)
119991, Москва, ул. Косыгина, 4, ФИЦ ХФ РАН
тел: +7-916-432-60-65
e-mail: kors36@mail.ru
30.11.2022

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

Подпись д.х.н., профессора Корсунского Б.Л. заверяю
Ученый секретарь ФИЦ ХФ РАН
30.11.2022



М.Н. Ляричев МП