## ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Горн Маргариты Викторовны «Высокоточные квантовохимические расчеты кинетики и механизма 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

Диссертационная работа Горн М.В. посвящена исследованию термической стабильности энергоемких веществ, которая является чрезвычайно важной характеристикой этих соединений и, кроме того, подчас определяет и их чувствительность к механическим воздействиям. Таким образом, представленная работа направлена на повышение безопасности энергетических соединений при их производстве, хранении, обращении и транспортировке. В работе исследованы как относительно «простые» моноциклические структуры, например, 3,5-динитропиразол, так и более сложныме соединения, содержащие несколько структурных фрагментов, соединенные азо-мостиком (1,1'азобистриазол). Важно, что оба типа структур представляют и фундаментальный и практический интерес. Так, нитропиразолы – это важные строительные блоки в новых энергетических и лекарственных соединениях. Соединения второй группы, типа 1,1'-азобистриазола, обладают высокой механической чувствительностью и низкой термостойкостью, они представляют фундаментальный интерес, так как детальная информация о термической стабильности подобных структур с непрерывной цепочкой из большого числа атомов азота отсутствует в предыдущей литературе. Таким образом, проблема, решению которой посвящена диссертационная работа является актуальной. Выбор диссертантом объектов исследования отражает современные тенденции развития энергетических соединений.

Следует отметить широкий теоретический и практический кругозор и багаж знаний автора, логически стройный стиль изложения материала и большой объем выполненной работы. Теоретические и экспериментальная исследования выполнены диссертантом на высоком научном и техническом уровне. Результаты исследований опубликованы в научных изданиях (4 статьи в ведущих журналах, входящих в базы данных Scopus и Web of Science), а также апробированы на 10 отечественных и международных конференциях.

Автореферат и диссертация написаны хорошим научным языком, результаты изложены четко и понятно. В качестве замечания можно отметить, что:

- 1. В Таблице 1 автореферата и обсуждениях в тексте не указана размерность предэкспоненциального множителя.
- В тексте автореферата не приведены экспериментальные результаты, которые обсуждаются в пункте 3 выводов работы.

Указанные замечания не влияют на положительную оценку работы, представляющую собой законченное научное исследование. Считаю, что диссертационная работа «Высокоточные квантовохимические расчеты кинетики и механизма термического разложения энергетических гетероциклических соединений» 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 физикоматематических наук по специальности 1.3.17 — химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Пивкина Алевтина Николаевна

Доктор технических наук по специальности 05.17.07 «Химическая технология топлива и высокоэнергетических веществ»

Заведующая лабораторией энергетических материалов

Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук (ФИЦ XФ РАН)

119991 г. Москва, ул. Косыгина, 4

Телефон: 8-499-137-29-51

Электронная почта: icp@chph.ras.ru

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

ДАТА 28.12.2022 г.

Подпись Пивкиной А.Н. заверяю Ученый секретарь ФИЦ ХФ РАН ДАТА 28.12.2022 г.

\_(М.Н. Ларичев)

Муравьев Никита Вадимович

Кандидат технических наук по специальности 05.17.07 «Химическая технология топлива и высокоэнергетических веществ»

Ведущий научный сотрудник лаборатории энергетических материалов

Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН)

119991 г. Москва, ул. Косыгина, 4

Телефон: 8-499-137-29-51

Электронная почта: icp@chph.ras.ru

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

ДАТА 28.12.2022 г.

Подпись Муравьева Н.В. заверяю Ученый секретарь ФИЦ ХФ РАН ДАТА 28.12.2022 г.

(М.Н. Ларичев)