

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

Одним из многообещающих и активно развивающихся направлений современной химии и материаловедения является исследование новых термически стабильных и низкочувствительных к внешним воздействиям энергетических соединений. С этой точки зрения перспективными объектами представляются азотсодержащие гетероциклические производные, способные выделять большое количество энергии за счет высокой теплоты образования, которая достигается наличием одинарных и кратных связей азот-азот. Соединения данного типа характеризуются высоким удельным энергетическим содержанием и могут быть востребованы в качестве компонентов ракетного топлива и взрывчатых веществ. Кроме того, подобные вещества могут найти применение в горнодобывающей области. В этой связи диссертационное исследование Горн М.В., посвященное высокоточным квантовохимическим расчетам кинетики и механизма первичных процессов термического разложения энергетических гетероциклических соединений, представляется актуальным.

В ходе выполнения работы методами квантовой химии и термического анализа соискателем установлены механизмы первичных процессов термического разложения для нескольких групп энергетических соединений: диаминотетразола, бис-производных тетразола и триазола, 3,5-динитропиразола и 5-аминодинитропиразола. Определены переходные состояния, интермедиаты и продукты этих реакций, рассчитаны активационные барьеры и константы скорости исследуемых реакций разложения. Для бис-производных тетразола и триазола показано, что значение относительной энтальпии азидного интермедиата может быть использовано для быстрой оценки стабильности таких соединений. Для нитропиразолов обнаружены новые каналы разложения, которые ранее не обсуждались в литературе.

Несомненным достоинством диссертационной работы, обуславливающим её практическую значимость, является детальное исследование механизмов доминирующих первичных реакций термического разложения обсуждаемых азотсодержащих гетероциклических соединений. Выявлены взаимосвязи между строением и свойствами, в частности, установлено влияние длины непрерывных азотных цепочек в структуре и различных типов мостиков и заместителей на эффективную константу скорости разложения. Объяснена автокаталитическая природа разложения 5-амино-3,4-динитропиразола, установлены корреляции результатов расчётов с имеющимися в литературе данными. Понимание детальных механизмов разложения позволит в будущем вести направленный поиск новых энергетических соединений и управлять их кинетической стабильностью.

В качестве замечания можно отметить следующее: на стр. 7 автореферата указано, что “Поиск стационарных точек на поверхности потенциальной энергии ... производился

вручную.” Не совсем ясно, что при этом имелось в виду. Вероятно, в тексте диссертационного исследования приведено детальное описание процедуры поиска минимумов.

Аккуратно оформленный и иллюстрированный автореферат даёт исчерпывающее представление о проделанной работе; неоднократные выступления соискателя на конференциях и публикация четырех статей в авторитетных международных изданиях, в том числе в журналах из первого квартиля, свидетельствуют о широком обсуждении полученных результатов диссертационного исследования. Считаю, что диссертационная работа «Высокоточные квантовохимические расчеты кинетики и механизма термического разложения энергетических гетероциклических соединений», вносящая весомый вклад в исследование устойчивости и механизмов разложения азотсодержащих 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 её 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.

Старикова Алёна Андреевна

доктор химических наук

специальность 1.4.4. (02.00.04) – физическая химия

ведущий научный сотрудник Отдела строения и реакционной способности органических соединений

Научно-исследовательский институт физической и органической химии
федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южный федеральный университет» (НИИ ФОХ ЮФУ)
344090, Россия, г. Ростов-на-Дону, пр. Стачки 194/2
Тел. +7(863)2184000, доб. 11543
Электронная почта: aastarikova@sfedu.ru
14 декабря 2022 г.

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

Подпись д.х.н. Стариковой А.А. удостоверяю:

Директор НИИ ФОХ ЮФУ, д.х.н.
14 декабря 2022 г.



А.В. Метелица