

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Горн Маргариты Викторовны
**«ВЫСОКОТОЧНЫЕ КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ КИНЕТИКИ И
МЕХАНИЗМА ПЕРВИЧНЫХ ПРОЦЕССОВ
ТЕРМИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ
ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ»**,

представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Диссертационная работа М.В. Горн посвящена квантовохимическим расчётам процессов термического разложения энергоёмких соединений, содержащих гетероциклы. Диссертант изучал первичные пути разложения соединений методом поиска возможных переходных состояний на гиперповерхности потенциальной энергии. Для первичной локализации переходных состояний автором были выполнены расчёты в рамках теории функционалов плотности. Дальнейшее уточнение энергий переходных состояний М.В. Горн осуществляла с использованием высокоточных пост-хартри-фоковских методов. Данный подход – весьма весомый аргумент в части достоверности полученных в работе результатах и сделанных на их основе выводах.

Энергетические гетероциклические соединения (ЭГ) содержат значительное количество связей N-N и N=N в молекуле, и они включают эти связи в состав циклов. Следовательно, ЭГ молекулы обладают высокой теплотой образования и относятся к наиболее перспективным взрывчатым веществам на основе лёгкой органики. Важно отметить, что способ установления первичных каналов разложения вещества при помощи прецизионного квантовохимического расчёта, который был выполнен в данной работе, является весьма важным, поскольку традиционные методы изучения высокоэнергетического разложения в большинстве случаев не позволяют определить начальные каналы разложения вещества. Знание первичных каналов является ключевым для построения последующих моделей разложения соединений ЭГ. Таким образом, работа М. В. Горн является весьма актуальной.

В диссертационной работе М. В. Горн использовала современный инструментарий квантовой химии: теорию функционала плотности (M06-2X) и пост-хартри-фоковские методы – CCSD(T)-F12 и DLPN-CCSD(T), а также термоаналитический метод – дифференциальную сканирующую калориметрию. Основная цель проделанной работы была в установлении механизмов первичных процессов термоллиза для некоторого перечня соединений ЭГ теоретически и, в определённых случаях, с использованием экспериментальных методов термического анализа. В расчётах геометрий возможных промежуточных соединений и их термодинамических свойств были определены первичные каналы разложения для ряда перспективных соединений ЭГ. Также были рассчитаны активационные барьеры для возможных реакций, и при помощи теории переходного состояния установлены константы скорости. Термокаталитическое исследование изучаемых веществ были выполнены М. В. Горн в коллаборации с ФИЦ ХФ РАН им. Н. Н. Семенова.

Работа М. В. Горн выполнена на высоком научном и методическом уровне. Результаты работы опубликованы в четырёх высокорейтинговых журналах и представлены на десяти международных конференциях, что является хорошим подтверждением высокого качества проделанной работы и надёжности результатов.

В работе, на мой взгляд, есть и некоторые недостатки:

1. На диаграммах, показывающих положение структур относительно друг друга в энергетических единицах, не ясен какой именно метод был использован для расчёта значения ΔG , ΔH и ΔN при $T=0$ К.
2. Если расчёты для некоторых соединений производились разными методами, то стоит привести значения ΔG , ΔH и ΔN при $T=0$ К в сравнении для каждого метода.

Однако, данные недостатки не умаляют важности диссертационного исследования. Благодаря своей актуальности, научной новизне, объёму

выполненных исследований и практической значимости полученных результатов, представленная диссертационная работа полностью отвечает критериям, определенным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней, предъявляемым к кандидатским диссертациям, № 842 от 24.09.2013г. (в действующей редакции), а ее автор, Маргарита Викторовна Горн, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

Доктор физико-математических наук,
руководитель отделения перспективных разработок и
заведующий лабораторией квантовой химии
Федерального государственного бюджетного учреждения
«Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»,
профессор кафедры квантовой механики физического факультета СПбГУ

Титов Анатолий Владимирович

Контактные данные:

Телефон: +7 (81371) 310-55

Электронная почта: titov_av@pnpi.nrcki.ru

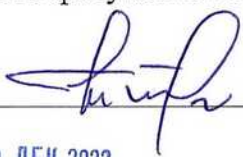
Адрес места работы:

188300, Ленинградская обл., г. Гатчина, мкр. Орлова роща, д. 1, ФГБУ

«Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова

Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

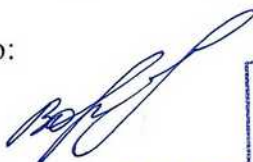
29.12.2022



29 ДЕК 2022

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

Подпись руки Титова А.В. заверяю:



Ученый секретарь
Воробьев С.И.

