

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Маргариты Викторовны 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

Исследования кинетики и механизмов термического разложения энергетических материалов крайне востребованы при разработке новых компонентов ракетных топлив, взрывчатых веществ, важны для горнодобывающей области, демонтажа сооружений и др. В этой области особый интерес представляют термически стабильные и низкочувствительные к внешним воздействиям энергетические соединения, среди которых в последнее время активно разрабатываются богатые азотом гетероциклические соединения и их производные. Важно отметить, что разложение таких соединений в основном происходит с образованием не парникового газа –  $N_2$ , что делает их ещё и экологически чистыми.

Новые данные о кинетике и механизмах первичных реакций термического разложения, безусловно, будут способствовать как эффективному решению задач безопасного хранения и транспортировки уже известных энергетических соединений, так и поиску новых типов таких соединений. Ввиду высоких скоростей и большого количества, одновременно осуществляющихся в процессах горения и взрыва стадий, крайне полезным является привлечение теоретических методов исследования. В связи с этим диссертационная работа М. В. Горн, которая посвящена высокоточным квантовохимическим расчетам кинетики и механизмов реакций термического разложения, является чрезвычайно актуальной.

Следует подчеркнуть, что в работе проведена проверка надежности используемых теоретических подходов при описании структурных и энергетических параметров получаемых стационарных точек, как относительно более высокоуровневых методов расчета, так и относительно экспериментальных данных. Это позволило, в конечном счете, говорить о высокой точности применяемых CCSD(T)-F12/VDZ-F12//M06-2X/6-311++G(2df,p) и DLPNO-CCSD(T)/aug-cc-pVQZ//M06-2X/6-311++G(2df,p) подходов и достоверности получаемых результатов.

В работе оценены кинетические и термодинамические характеристики первичных каналов разложения 1,5-диаминотетразола, бис-тетразолов и триазолов, 3,5-динитропиразола и 5-аминодинитропиразола. Для нитропиразолов обнаружены новые, более выгодные, первичные каналы термического разложения, а также вторичные реакции, которые вносят существенный вклад в автокаталитический характер их разложения. Последние результаты дополнительно подтверждены выполненными автором термоаналитическими экспериментами, что является еще одним достоинством данной диссертационной работы.

Полученные результаты являются важным дополнением экспериментальных исследований кинетики разложения энергетических материалов, могут эффективно использоваться для направленного варьирования их кинетической стабильности и поиска новых термически стабильных и низкочувствительных к внешним воздействиям энергетических соединений. Все результаты являются новыми, а выводы обоснованными, работа оставляет общее хорошее впечатление, основные результаты работы опубликованы в авторитетных международных изданиях.

Рассматриваемая диссертационная работа «Высокоточные квантовохимические расчеты кинетики и механизма первичных процессов 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 физико-математических наук по специальности. 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Орел Владимир Борисович  
кандидат химических наук  
специальность 02.00.04 – Физическая химия

Ведущий научный сотрудник лаборатории квантовохимического моделирования молекулярных систем

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Иркутский государственный университет» (ФГБОУ ВО ИГУ)

664003 г. Иркутск, ул. Карла Маркса, 1

Тел. +7 (395) 252 12 11

Электронная почта: [orelv@isu.ru](mailto:orelv@isu.ru)

20.12.2022

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

*В.О.*



Витковская Надежда Моисеевна

доктор химических наук

специальность 02.00.04 – Физическая химия, 02.00.03 – Органическая химия

заведующий лабораторией квантовой химии

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Иркутский государственный университет» (ФГБОУ ВО ИГУ)

664003 г. Иркутск, ул. Карла Маркса, 1

Тел. +7 (395) 252 12 11

Электронная почта: [vita@cc.isu.ru](mailto:vita@cc.isu.ru)

20.12.2022

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

*Н.М.*

