

## ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

о работе Горн Маргариты Викторовны по кандидатской диссертации «Высокоточные квантовохимические расчеты кинетики и механизма первичных процессов термического разложения энергетических гетероциклических соединений», представляемой на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Маргарита Викторовна Горн приступила к работе в нашей лаборатории студентом второго курса ФФ НГУ. Основное направление ее научной деятельности – теоретическое исследование кинетики термического разложения гетероциклических высокоэнергетических соединений. За время работы Маргарита стала квалифицированным специалистом в области современных высокоточных квантовохимических расчетов. Под моим руководством на кафедре химической и биологической физики ФФ НГУ она успешно защитила выпускные квалификационные работы бакалавра и магистра. Маргарита продолжила исследование термической стабильности энергетических соединений в очной аспирантуре НГУ, которую она окончила, защитив на «отлично» выпускную научно-квалификационную работу.

За время выполнения диссертационной работы Маргаритой проделан большой объем квантовохимических расчетов высокого уровня, требующих высокой квалификации. Она освоила широкий набор современных методов для высокоточных термохимических расчетов (например, явно коррелированных и локальных модификаций метода связанных кластеров). Маргарита является соавтором шести научных публикаций, результаты данной диссертационной работы изложены в четырех статьях, опубликованных в рецензируемых международных научных журналах, причем в трех из них она является первым автором. Она лично провела все расчеты, обсуждаемые в работах, выполнила часть экспериментов, принимала участие в обсуждении и интерпретации результатов экспериментов и расчетов и формулировке выводов. Маргарита неоднократно участвовала в работе крупных и представительных международных конференций и летних школ. Помимо многочисленных стипендий, премий и дипломов молодежных конференций, ее успехи отмечены личным грантом РФФИ для аспирантов и Стипендией Президента РФ для аспирантов и молодых ученых. Кроме того, в рамках еще одного проекта РФФИ она проходила стажировку в ведущей отечественной группе термоаналитиков-экспериментаторов под руководством д.т.н. А.Н. Пивкиной (ФИЦ ХФ РАН им. Семенова, Москва).

Представленная М.В. Горн диссертация посвящена исследованию кинетики и механизма термического разложения гетероциклических энергетических соединений.

Информация о механизме термолитза и константах скорости элементарных стадий важна как для моделирования свойств уже существующих материалов и их усовершенствования, так и для предсказания свойств новых материалов и отбора наиболее перспективных из них для дальнейшего изучения. В силу энергетической природы данных веществ, экспериментальное исследование кинетики их разложения естественным образом затруднено. Квантовохимические расчеты являются незаменимым инструментом в данной области и эффективно дополняют эксперимент (например, термоаналитический).

В рамках работы аспиранта были исследованы первичные процессы термического разложения ряда богатых азотом энергетических гетероциклических соединений: диаминотетразола, азобис-производных тетразола и триазола, 3,5-динитропиразола и 5-амино-3,4-динитропиразола с помощью высокоточных квантовохимических расчетов и современных методик термического анализа. С использованием современных количественных квантовохимических методов были установлены детальные механизмы разложения всех исследуемых соединений, рассчитаны активационные барьеры и константы скоростей первичных реакций разложения. Для диаминотетразола определены таутомерные формы, играющие наиболее важную роль в механизме термического разложения и устранены многочисленные противоречия относительно механизма термолитза, существовавшие в литературе. Для бис-производных тетразола и триазола установлена связь между структурой и свойствами, показано влияние структуры на чувствительность к внешним воздействиям. В случае 3,5-динитропиразола помимо расчетов проведены термоаналитические эксперименты, а для 5-аминодинитропиразола при помощи расчетов объяснена автокаталитическая природа разложения. В целом, представлена работа серьезного объема и глубины, позволяющая заметно продвинуться в понимании деталей термического разложения энергетических гетероциклов.

Помимо научной работы, Маргарита активно участвовала в педагогической деятельности: в течение четырех лет вела практические занятия по молекулярной физике для первокурсников ФФ НГУ. По итогам анкетирования студентов отзывы о ее работе неизменно высокие. Кроме того, она деятельно участвовала в организационной работе на кафедре химбиофизики ФФ НГУ – ведет ее сайт и паблики кафедры в соцсетях.

Из всего перечисленного ясно, что М.В. Горн зарекомендовала себя очень хорошо подготовленным, инициативным и самостоятельным аспирантом. Выполненный объем исследований свидетельствует также о ее трудолюбии и ответственном отношении к поставленным задачам. Считаю, что диссертационная работа Маргариты Викторовны Горн является цельным научным исследованием, соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 1.3.17 «Химическая физика, горение и



взрыв, физика экстремальных состояний вещества», а сама М.В. Горн заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук.

Научный руководитель  
Кандидат физико-математических наук,  
с.н.с. лаборатории квантовой химии и  
компьютерного моделирования  
Федерального государственного бюджетного  
учреждения науки Институт химической  
кинетики и горения им. В.В. Воеводского  
Сибирского отделения  
Российской академии наук  
ул. Институтская 3, 630090 Новосибирск,  
Россия

Киселев Виталий Георгиевич

Тел.: (383) 333-33-48

Эл. почта: [vitaly.kiselev@kinetics.nsc.ru](mailto:vitaly.kiselev@kinetics.nsc.ru)

01 сентября 2022 г.

Подпись Киселев В.Г. удостоверение



Ученый секретарь  
ИХКГ СО РАН  
к.ф.-м.н.  
Пыряева А.П.