

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Сунцовой Марины Александровны
«Прогнозирование энтальпий образования новых азотосодержащих высокоэнергетических соединений на основе квантово-химических расчетов», представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Диссертационная работа посвящена актуальной теме: развитию теоретического подхода, позволяющего рассчитывать энтальпию образования азотосодержащих высокоэнергетических соединений в газообразном и кристаллическом состоянии с точностью, достигающей 10 кДж/моль.

Существенными достижениями работы являются:

- (1) Выявление азотосодержащих соединений, экспериментальные значения энтальпий образований которых определены неточно, посредством квантово-химических расчетов более 200 соединений с использованием многоуровневого аппроксимированного метода G4;
- (2) Модификация уравнения Полицера, позволяющая предсказывать энтальпию сублимации кристаллов азотосодержащих высокоэнергетических соединений, с привлечением результатов квантово-химических расчетов;
- (3) Оценка энтальпий образования 32 перспективных азотосодержащих высокоэнергетических соединений в газовой и конденсированной фазе.

Особую ценность представляет использование в работе метода изодесмических реакций, позволяющего рассчитывать значения энтальпий образования некоторых высокоэнергетических соединений в газовой фазе с точностью 3 - 7 кДж/моль.

При прочтении автореферата М.А. Сунцовой появляются следующие замечания.

1) Для расчета электростатического потенциала в работе использовалась волновая функция, рассчитанная методом B3LYP/cc-pVTZ. Выбор этого базисного набора никак не обоснован в автореферате.

2) На стр. 5 автореферата использован неудачный термин «азотосодержащие АВЭС».

Проведенные исследования по своей актуальности, научной новизне, объёму и практической значимости полученных результатов, соответствует требованиям п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней (утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. №842), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор, М.А. Сунцова, заслуживает присуждения ученой степени кандидата наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Михаил Владимирович Венер

доктор физико-математических наук по специальности 01.04.17

доцент по специальности «Химическая физика»

Почтовый адрес: 125047 Россия, Москва Миусская пл., 9

тел. +(7) 499-978-9584

e-mail: mikhail.vener@gmail.com

Российский Химико-Технологический

Университет им. Д.И. Менделеева,

профессор кафедры неорганической химии

05.12.2016

Подпись М.В. Венера

удостоверено



(Варшавский М.А.)