

## ОТЗЫВ

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

Диссертационная работа М. А. Сунцовой посвящена разработке подхода для прогнозирования энтальпий образования АВЭС (азотсодержащих высокоэнергетических соединений) с использованием результатов квантово-химических расчетов и его применении для определения энтальпий образования ряда новых перспективных АВЭС.

Несмотря на повышенный интерес к теоретической оценке энтальпии образования АВЭС, ввиду большой трудоемкости экспериментального определения их энергетических характеристик, а также высочайшей важности достоверного предсказания свойств новых материалов и определения наиболее перспективных из них для дальнейшего изучения, минуя стадию предварительного синтеза новых АВЭС, на сегодняшний день не существует модели предсказания энтальпии образования, универсальной для АВЭС различной структуры.

Поэтому предложенные автором модели для оценки энтальпий сублимации молекулярных кристаллов АВЭС и энергий кристаллической решетки высокоэнергетических солей вносят серьезный вклад в развитие теоретических моделей для предсказания физико-химических свойств на основе параметров молекулярного электростатического потенциала и несомненно должны быть использованы для полифункциональных АВЭС различного строения.

Кроме того, автором впервые на высоком теоретическом уровне выполнена оценка энтальпий образования в газообразном и кристаллическом состоянии 32 перспективных азотсодержащих АВЭС. А результаты анализа точности экспериментальных данных по энтальпиям образования и сублимации более 200 азотсодержащих соединений несомненно представляют практический интерес для исследователей, работающих в областях науки и техники, использующих термохимические данные.


Например, было показано, что первоначально определенная экспериментальная величина энтальпии образования ТКХ-50 и SMX, рассматриваемых в последние годы в качестве наиболее перспективных ВЭС, значительно завышены.

В качестве замечания к автореферату можно отметить следующее: в работе не рассматривался класс полинитроэфиров и поэтому полученное большое расхождение

между экспериментальной и рассчитанной энтальпией образования SMX может быть отчасти обусловлено этим.

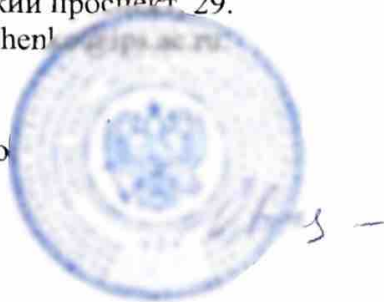
Сделанное замечание не влияет на высокую оценку работы, которое представляет собой законченное актуальное научное исследование, в ходе которого получены принципиально важные новые результаты, достоверность которых не вызывает сомнений.

Исходя из представленных в автореферате сведений, диссертация написана на высоком научном уровне и полностью соответствует п.9 положения ВАК «О порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842. Сунцова Марина Александровна, несомненно, достойна присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 - физическая химия.

Старший научный сотрудник,  
кандидат химических наук (02.00.08 – химия элементоорганических соединений)  
Андрей Федорович Асаченко 

ФГБУН Институт нефтехимического синтеза им. А. В. Топчиева Российской академии наук,  
лаборатория органического катализа.  
119991, ГСП-1, Москва, Ленинский проспект, 29.  
Тел.: 84956475927. E-mail: aasachenko@icp.ac.ru

Подпись А. Ф. Асаченко заверяю  
Ученый секретарь ИНХС РАН  
К.х.н.



«17» ноября 2016

И. С. Калашникова