

**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).

Работа выполнена в лаборатории молекулярной спектроскопии кафедры
физической химии химического факультета

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего образования

«Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова»

Исследование автора относится к перспективному направлению физической химии – методам прогнозирования термодинамических свойств веществ на базе квантово-химических расчетов. **Актуальность** работы связана с возможностью избежать постановки сложных измерений для множества практически важных соединений, а также преодолеть неопределенности, присущие феноменологическим оценкам. **Практическая значимость** работы связана с ее ориентацией на широкий круг азотных высокоэнергетических соединений (АВЭС), используемых в качестве взрывчатых веществ.

Работа автора сосредоточена на прогнозировании двух важнейших термодинамических характеристик: энтальпии образования молекул в газовой фазе и энтальпии сублимации конденсированного вещества.

Для расчета энтальпий образования газообразных молекул автором предложен метод *изодесмических* реакций (с сохранением числа связей каждого вида), позволяющий устранить характерные для методов высокого уровня систематические погрешности за счет электронных корреляций. Используемый автором подход обеспечивает в термохимических оценках точность, сравнимую с точностью опытных данных. Помимо прогноза неизвестных величин, предложенный метод позволяет контролировать известные из эксперимента значения на взаимную согласованность, выявляя недостоверные значения. В итоге для широкого круга АВЭС в диссертации сформирован набор согласованных значений энтальпий образования в газовой фазе, что создает базу для дальнейших оценок по этому методу.

Применительно к расчету кристаллических веществ, автор нашел место для квантово-химических расчетов при параметризации полуэмпирического метода, связывающего энтальпию сублимации с электростатическим потенциалом. Преимуществом подхода автора является тщательный отбор экспериментальных данных для параметризации и тестирования, что позволило избежать больших ошибок, присущих альтернативным полуэмпирическим методам. Наличие данных по сублимации позволило автору дать оценки и энтальпии образования ряда соединений в твердой фазе. При этом были существенно уточнены известные в литературе значения, а в ряде случаев энтальпия образования была определена впервые. Точность этих оценок в зависимости от типа и размера молекулы составляет 10-25 кДж/моль.

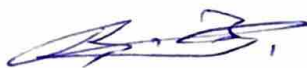
В целом, работа Сунцовой М.А. представляет собой серьезное исследование, с разработкой новых методов термодинамического расчета и получением большого объема новых данных. Помимо хорошего владения методами квантовой химии, автора отличает требуемое в термохимии внимание к качеству эксперимента, анализу достоверности и согласованности опытных и рассчитанных величин.

Результаты диссертации представлены в 7 статьях, опубликованных в журналах, индексируемых в базе данных Web of Science, а также в ряде сборников и докладах на международных и отечественных конференциях.

Содержание работы 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 достоин присуждения ученой степени кандидата наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Ведущий научный сотрудник Объединенного института высоких температур РАН,
к.ф.-м.н. Зицерман Владимир Юрьевич

15 ноября 2016 г.



Сведения об авторе отзыва

ФИО: Зицерман Владимир Юрьевич

Ученая степень: кандидат физико-математических наук, шифр специальности ВАК
01.04.17

Почтовый адрес: Москва 105043, Первомайская ул. , 43, кв. 15

Телефон (916) 563-6598

Электронная почта: vz1941@mail.ru

Наименование организации: Федеральное государственное бюджетное учреждение
науки Объединенный институт высоких температур РАН (ОИВТ РАН)

Должность: ведущий научный сотрудник

Подразделение: Научно-исследовательский центр электрофизики и тепловых процессов
(НИЦ-4 ЭФТП), Отдел теплофизических данных

