

## ОТЗЫВ

**Пивиной Татьяны Степановны,**

д.х.н. (02.00.04 - физическая химия), профессора, ведущего научного сотрудника  
лаб. «Математической химии и компьютерного синтеза»  
Института органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН  
(почтовый адрес: 117463, Москва, ул. Паустовского, дом 3, кв. 512; тел. 8 499 137 6300;  
адрес эл. почты: [tsp@ioc.ac.ru](mailto:tsp@ioc.ac.ru))

на автореферат диссертации

**Сунцовой Марины Александровны**

**“ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ЭНТАЛЬПИЙ ОБРАЗОВАНИЯ НОВЫХ  
АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ НА  
ОСНОВЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ»,**

представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук  
по специальности 02.00.04 – физическая химия.

В основе современных методов оценки перспективности использования энергоёмких материалов лежат экспериментальные и теоретические исследования базовых свойств, определяющих их эффективность. В представленной работе разработана методика и выполнены расчеты одного из основополагающих свойств такого рода – энтальпии образования веществ. При этом перед диссертантом возник **ряд проблем, решение которых и определило актуальность исследования.**

**Целью работы** явилась разработка подхода к оценке энтальпии образования азотсодержащих энергоёмких соединений и определение этой характеристики как для известных, так и для ряда новых, потенциально перспективных веществ.

**Новизна исследования и полученных результатов** диссертации М.А. Сунцовой **несомненны.**

**Практическую значимость работы** определяют разработанная методика оценки энтальпий сублимации и далее энтальпии образования молекулярных кристаллов и солей большого ряда полиазотистых соединений, а также оценка перспектив их использования.

Диссертантом проделана большая работа по созданию некой базы данных с оценкой точности в определении экспериментальных значений энтальпий сублимации и образования весьма широкого круга азотсодержащих соединений различных химических классов, что уже само по себе представляет ценность для научных исследований и расчетов целевых параметров ВВ и компонентов ракетных топлив.

Поражает объем вычислений, выполненных автором, и тщательность в анализе точности экспериментальных и расчетных методов, что позволяет в дальнейшем многим

исследовательским группам использовать результаты диссертационной работы М.А. Сунцовой.

Весьма информативен литературный обзор методов, используемых в настоящее время для расчетов термодинамических характеристик – здесь и аддитивные схемы, и QSPR подход, методика Политцера и метод изодесмических реакций, - все это представляется чрезвычайно полезным. Однако удручает то, что в работе лишь упоминается метод атомно-атомных потенциалов (ААП), - единственный метод, основанный на *физической модели кристаллов*, а не на *аддитивных подходах или же корреляционных и статистических методиках*. Используемая диссертантом (равно как и множеством других исследователей) модель молекулярного электростатического потенциала (Политцера) *не позволяет конструировать кристалл* и основана лишь на структурных и электронных особенностях молекул.

Следует также отметить, что утверждение автора о том, что точные неэмпирические расчеты энтальпии сублимации пока возможны только для небольших молекул не является точным: в литературе представлено не мало примеров моделирования кристаллической упаковки весьма сложных молекул в рамках квантово-химических методов путем оптимизации параметров элементарной ячейки и локализации соответствующих минимумов поверхности потенциальной энергии.

Весьма спорно умозаключение автора о конформерах: дело не в том, что «поправка на смесь конформеров, как правило, незначительно влияет на величину энтальпии образования», а в том, что в рамках методологии, используемой в работе, при отсутствии физической модели, характеристики конформеров и далее полиморфов не могут быть оценены.

Не могу согласиться с выводом автора и о том, что «*предложена модель* для предсказания энтальпии образования азотсодержащих высокоэнергетических солей». Следовало бы этот вывод сформулировать как «*разработана методика* для расчетов энтальпии образования азотсодержащих соединений, в том числе, и солей».

Что касается изложения диссертационной работы, она содержательна, написана на профессиональном языке и достаточно хорошо иллюстрирована.

В целом, выполненное исследование «ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ЭНТАЛЬПИЙ ОБРАЗОВАНИЯ НОВЫХ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ» по своей актуальности, научной новизне, объему 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 его автор – Сунцова Марина Александровна - достойна присуждения ученой степени кандидата наук по специальности 02.00.04 - Физическая химия.

Профессор, д.х.н.,

ведущий научный сотрудник

лаборатории «Математической химии и компьютерного синтеза»

Института органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН

/Т.С. Пивина/

Подпись Т.С. Пивиной удостоверяю

Ученый секретарь ИОХ РАН, к.х.



/И.К. Коршевец/

9.12.2016