

## О Т З Ы В

на автореферат диссертации Сунцовой М.А. «Прогнозирование энтальпий образования новых азотсодержащих высокоэнергетических соединений на основе квантовохимических расчетов», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия

Работа Сунцовой М.А. направлена на квантовохимическое исследование высокоэнергетических полиазотистых соединений, многие из которых являются объектами, используемыми в качестве компонентов порохов, взрывчатых веществ и ракетных топлив. Эти соединения, как правило, являются объектами “неудобными” для экспериментального определения энтальпий образования методом калориметрии сжигания в калориметрических бомбах. Это определяется тем, что удельная энергия сгорания этих соединений обычно в несколько раз ниже энергий сгорания углеводородных соединений. Это требует для стандартной методики сжигания навесок вещества массой в несколько граммов. Такие количества высокочистых веществ трудно и дорого синтезировать, а главное, предельно возможное количество вещества, которое может сгореть в калориметрической бомбе без взрыва и разрушения установки во многих случаях составляет всего несколько миллиграмм. В тоже время энтальпии образования являются основной энергетической характеристикой, позволяющей оценивать эффективность данного соединения, его взрывчатые свойства и удельную тягу, как компонента ракетного топлива. Учитывая сказанное, очевидно, что развитие расчетных методов определения энтальпий образования высокоэнергетических соединений является чрезвычайно актуальной и практически важной задачей. Особенно важно то, что эти работы позволяют определить энгетику не только уже синтезированных соединений, но и прогнозировать направления наиболее перспективных исследований создания новых энергонасыщенных веществ.

С Дорофеевой О.В. и Сунцовой М.А. мы довольно тесно сотрудничаем последние годы и следует отметить, что за это время прецизионность их расчетов очень значительно возросла. Следует отметить, что различные типы нитросоединений (нитро-, нитрамины, нитраты, фуразаны и др.) обладают значительными межгрупповыми взаимодействиями, что существенно затрудняет получение надежных расчетных величин. Однако, в данной работе автору в

значительной мере удалось преодолеть эти трудности и были получены для абсолютного большинства соединений данные на уровне лучших экспериментальных исследований.

В качестве **замечания** могу отметить, что расчеты перенасыщенных группировками соединений пока ещё получаются не очень хорошо, что несколько не снижает высокого уровня рецензируемой работы.

Работа очень нужная и выполнена на самом высоком уровне. Современные квантовохимические расчеты в области полиазотистых высокоэнергетических соединений, как российских, так и зарубежных авторов, к сожалению, даже близко не лежат с уровнем работ аспирантов Дорофеевой О.В., в частности, с данной работой.

Рецензируемая работа выполнена по актуальной теме на высочайшем научном уровне, по актуальной, практически важной тематике и полностью удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Сунцова М.А., заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Доктор химических наук (02.00.04),  
старший научный сотрудник,  
главный научный сотрудник лаборатории  
термодинамики высокоэнергетических систем  
ФГБУН Институт химической физики  
им. Н.Н.Семенова Российской академии наук

Мирошниченко Евгений Александрович

119991, г. Москва, ул. Косыгина, 4.  
Тел. 8(495) 939-7463  
8(915)474-6040  
Email: eamir02@mail.ru  
06.12.2016



Собственноручную подпись  
сотрудника Е.А. Мирошниченко  
удостоверяю  
Секретарь