

## Отзыв

на автореферат диссертационной работы 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

Рассматриваемая диссертационная работа посвящена решению исключительно важной задачи – разработки подходов для прогнозирования термодинамических характеристик, энтальпий образования, с использованием результатов квантово-химических расчетов. Важность, равно как и актуальность, такого исследования определяют, в немалой степени, объекты исследования, к которым указанный подход был применен: это азотсодержащие высокоэнергетические соединения.

Следует отметить, что экспериментальное получение энергетических характеристик таких соединений является отнюдь непростой задачей.

Для решения поставленной в работе задачи использовался адекватный набор современных теоретических подходов, в т.ч. специализированных опций квантово-химического программного пакета Gaussian, таких как G-4 и его модификаций, сориентированных именно для расчета термодинамических функций.

Важно также отметить, что авторы провели тщательный отбор экспериментальных значений, используемых для параметризации и тестирования предложенной в работе модели, а сама разработанная модель позволяет применять её для разнообразных C, H, N, O содержащих соединений.

Личный вклад соискателя в выполнение работы является достаточно весомым, причем на всех этапах выполнения работы.

Каких-либо значимых замечаний по работе не имеется, отмечу лишь возникший при чтении автореферата вопрос:

- Исследовалась и учитывалась ли для исследуемых соединений возможность наличия поворотных конформеров?

Результаты диссертации достаточно полно представлены в 17 публикациях, включая 7 статей в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК. Работа прошла апробацию на всероссийских и международных научных конференциях.

По своей актуальности, научной новизне, теоретической и практической значимости, достоверности результатов и обоснованности выводов представленная диссертационная работа Сунцовой Марины Александровны «Прогнозирование энтальпий образования новых азотсодержащих высокоэнергетических соединений на основе квантово-химических расчетов» является научно-квалификационной ра-

ботой и полностью отвечает критериям, установленным в п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г., предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а её автор заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Доктор химических наук  
(специальность 02.00.04 – физическая химия),  
доцент,  
заведующий кафедрой физической и коллоидной химии  
федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Ивановский государственный химико-технологический университет»

**Адрес:** 153000, г. Иваново, пр. Шереметевский, 10

**Телефон:** +7(4932) 327397, коммутатор  
+7(4932)307346 доб. 314, моб. +79051095974

**Эл. почта:** shlykov@isuct.ru

Шлыков Сергей Александрович

Иваново, 07 декабря 2016 г.

Подпись *Шлыков*

Ученый секретарь

