



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)»
(СПбГТИ(ТУ))

Московский пр., д.26, Санкт-Петербург, 190013,
телеграф: Санкт-Петербург, Л-13, Технолог,
Тел./Факс (812) 315-1134

Отзыв

на автореферат диссертации Смирновой Анастасии Дмитриевны

«Термическое разложение и горение гибридных гетероциклических соединений»,
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по
специальности 2.6.12. «Химическая технология топлива и высокоэнергетических веществ».

Целью диссертационного исследования Смирновой Анастасии Дмитриевны было
изучение термической стабильности и закономерностей горения новых гибридных
соединений.

Актуальность работы заключается в изучении термического разложения и горения
гибридных соединений, содержащих различные гетероциклические системы. Гетероциклы
с высоким содержанием азота и их производные представляют значительный интерес в
связи с их многочисленными применениями в качестве экологически чистых
высокоэнергетических материалов. Возможность практического использования новых
энергетических материалов (ЭМ) зависит от комплекса их свойств. Наряду с
энергетическими характеристиками, это, в первую очередь, химическая стабильность, а
также закономерности горения.

Научная новизна диссертации обусловлена тем, что впервые в неизотермических и
изотермических условиях детально исследован термический распад новых гибридных
соединений, содержащих пиразольные и тетразольные кольца, а также ациклические
нитраминаы сконденсированные с фуразановым или тетразольным кольцом.

Практическая значимость работы заключается в том, что в результате проведенных исследований найдено, что N-пиразолилтетразолы являются быстрогорящими соединениями, что позволяет рассматривать их в качестве модификаторов горения ракетных топлив и порохов.

Автор имеет 8 публикаций, в том числе 3 статьи в изданиях, индексируемых в международных базах данных Web of Science и Scopus.

Во **введении** автором раскрыта общая характеристика диссертационного исследования и обоснована актуальность темы, излагаются задачи и цель исследования, обосновываются научная новизна и практическая значимость.

В **первой** главе приведен анализ научной литературы свойств некоторых энергонасыщенных классов веществ, которые входят в состав гибридных молекул. Особое внимание уделено закономерностям горения и термического распада тетразолов, фуразанов, пиразолов и циклических нитраминов.

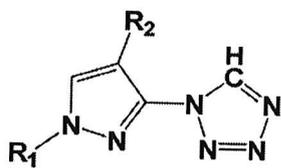
Во **второй** главе приведены используемые в работе методики.

В **третьей** главе приведены экспериментальные результаты.

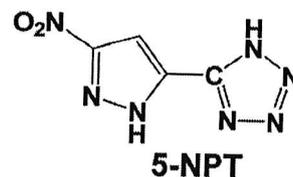
Четвертая глава посвящена обсуждению результатов.

При помощи термопарной методики было установлено, что 1,3-динитропиразол (1,3-DNP) и 1,4-динитропиразол (1,4-DNP), горят по механизму с ведущей реакцией в конденсированной фазе, а сам процесс горения контролируется реакцией в расплаве.

Затем автором были исследованы гибридные пиразолил(тетразолы). Было показано что термическая стабильность изученных пиразолил(тетразолов) увеличивается в следующем порядке: DNPT < 1-NPT < NAPRT < 4-NPT < 5-NPT, где



R₁=NO₂, R₂=H (1-NPT)
R₁=H, R₂=NO₂ (4-NPT)
R₁=R₂=NO₂ (DNPT)
R₁=NH₂, R₂=NO₂ (NAPRT)



Кинетические параметры разложения этих соединений позволяют делать прогнозы термической безопасности. Было показано, что 1-NPT (и менее стабильный DNPT) требует особых условий хранения, все остальные пиразолил(тетразолы) обладают удовлетворительной стабильностью. Найдено, что все N-замещенные пиразолил(тетразолы) являются быстрогорящими веществами.

Аспиранткой были исследованы термическая стабильность и закономерности горения гибридных гетероциклических соединений на основе фуразана и циклических нитраминол: 4,6,8-тринитро-4,5,7,8-тетрагидро-6Н-фуразано-[3,4-f]-1,3,5 триазепина (FRDX) и 1,4,5,8-тетранитроазадифуразано-[3,4-c][3,4-h]-декалина (FTNAD). Квантово-химический расчет полуэмпирическим методом AM1 показывает, что введение фуразанового цикла приводит к удлинению связи N-NO₂, то есть снижению термической устойчивости.

Ранее при изучении взаимосвязи структура-свойство ряда циклических нитраминол было найдено, что константы скорости распада коррелируют с длинами наименее прочных связей N-NO₂. Предложенную зависимость, по мнению диссертанта, можно использовать для прогнозирования свойств перспективных ЭМ, в состав которых входит азациклический нитрамин. Смирновой А.Д. были рассчитаны длины связей N-NO₂ трех гипотетических потенциально мощных ЭМ и показано, что одно из них термически устойчиво и может быть перспективным.

К недостаткам автореферата следует отнести использование полуэмпирического метода AM1 для прогнозирования устойчивости гипотетических ЭМ, который, как известно, недостаточно корректен при расчёте характеристик полиазотистых гетероциклол, в том числе изомеров.

Замечание носит частный характер и на касается существа проведенных исследований.

Выводы Смирновой А. Д. по результатам исследований представляются обоснованными.

Считаю, что диссертация «Термическое разложение и горение гибридных гетероциклических соединений», является завершенной научной квалификационной работой, содержащей решение актуальной задачи изучения термического разложения и горения ЭМ, содержащих различные гетероциклические системы. Диссертация соответствует требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 года, а ее автор, Смирнова Анастасия Дмитриевна, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата химических наук по специальности 2.6.12. «Химическая технология топлива и высокоэнергетических веществ».

Даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Профессор, доктор химических наук,

Профессор



Илюшин Михаил Алексеевич

Тел./Факс (812) 315-1134, e-mail: explaser1945@yandex.ru

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования

«Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)» (СПбГТИ(ТУ))

190013, Санкт-Петербург: Московский пр., 26

Подпись *Илюшина М. А.*
10.11.2022 удостоверяю
Начальник отдела кадров



А. В. Прохорова