

## ОТЗЫВ

**на автореферат диссертации Конновой Марии Евгеньевны  
«Термодинамика полициклических ароматических и азотсодержащих  
гетероциклических соединений – перспективных носителей водорода»,  
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук  
по специальности 1.4.4. Физическая химия.**

Диссертационная работа Конновой М.Е. посвящена исследованию термодинамических характеристик реакций гидрирования-дегидрирования ряда полициклических ароматических и гетероциклических соединений и определению термодинамических параметров этих веществ в индивидуальном состоянии экспериментальными и расчетными методами для обоснования концепции использования жидких органических носителей водорода. Актуальность работы обусловлена требованиями современной энергетической и транспортной системы в связи с планируемым переходом на альтернативные источники энергии и, в частности, водород, а также тем, что разработка, оптимизация и внедрение новых жидких систем для аккумулирования водорода должны основываться на термодинамическом анализе процессов его связывания и освобождения. Полученные соискателем результаты развивают представления об особенностях протекания реакций гидрирования-дегидрирования в зависимости от структуры соединения, существенно пополняют базу данных по физико-химическим характеристикам (и особенно по термодинамическим свойствам) как ароматических, так и гетероциклических азотсодержащих веществ; могут быть применены для выбора оптимальных жидких систем аккумулирования водорода; использованы в учебном процессе при преподавании общего курса «физическая химия» и специальных курсов для студентов высших учебных заведений химического и химико-технологического профиля, а также для создания справочных изданий.

Соискателем впервые изучено равновесие реакции гидрирования-дегидрирования в широком диапазоне температур, в газовой и жидкой фазах ряда перспективных носителей водорода, определены температурные зависимости констант равновесия и термодинамические параметры исследованных процессов. Полученные результаты верифицированы данными квантово-химических расчетов, что позволило разработать процедуру поиска и выбора соединений для их использования в качестве жидких органических носителей водорода. Получены стандартные энергии сгорания и энтальпии образования для 12 производных индола и аминоспиртов. Для 23 соединений определены температурные зависимости давления насыщенного пара и вычислены термодинамические параметры их парообразования. Рекомендовано на практике использовать 2-аминоэтанол как наиболее эффективный носитель для хранения водорода.

Достоверность полученных Конновой М.Е. результатов определяется современными и надежными методами, использованными в работе: хромато-масс-спектрометрия, газожидкостная хроматография, метод химического равновесия, метод транспирации, калориметрия сгорания, статистический анализ, а также взаимной согласованностью полученных экспериментальных и теоретических данных. Представляется, что обработка опытных данных, вычисление физико-химических величин и получение корреляционных соотношений выполнены корректно; выводы аргументированы и обоснованы; результаты исследований хорошо

опубликованы (одна статья в журнале первого квартала и четыре – второго квартала). Сама работа выглядит структурированной, цельной и логично построенной.

Из замечаний по тексту автореферата следует отметить следующее:

- В отличие от заявленного в тексте, опытные и расчетные значения энтальпий реакций R-III и R-IV в таблице 9 не согласуются в пределах приведенных погрешностей. Чем это различие может быть обусловлено?
- Представляется, что в пятом столбце таблицы 10 для второго, третьего и четвертого вещества приведены экспериментальные, а не теоретические, значения.
- В таблице 12 для 2-(диэтил-амино)-этанола данные не верны из-за смещения данных по горизонтали.

Приведенные выше замечания не имеют принципиального характера и не могут повлиять на положительную оценку работы в целом.

Диссертационная работа Конновой Марии Евгеньевны «Термодинамика полициклических ароматических и азотсодержащих гетероциклических соединений – перспективных носителей водорода» по объему и качеству выполненных исследований, актуальности поставленной задачи, новизне, достоверности и научной обоснованности полученных результатов и выводов полностью соответствует требованиям пункта 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842, как научная квалификационная работа, в которой содержится решение задач, имеющих важное значение для развития физической химии полициклических ароматических и гетероциклических соединений и создания технологических основ для оптимизации и практического внедрения концепции жидких органических носителей водорода, а сам диссертант Коннова М.Е. заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Заведующий кафедрой физической химии  
Белорусского государственного университета  
доктор химических наук, профессор  
(220030 Республика Беларусь, г. Минск,  
ул. Ленинградская, 14,  
химический факультет,  
кафедра физической химии  
e-mail: blokhin@bsu.by  
тел.: +375172095197  
02.00.04 – физическая химия)

Андрей Викторович Блохин

25.01.2023

