

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы

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

Представленная диссертационная работа Конновой М.Е. посвящена одной из важнейших проблем современной физической химии: исследованию с термодинамической точки зрения реакций гидрирования и дегидрирования жидких органических соединений. Работа вносит существенный вклад в развитие водородной энергетики, поскольку выбранные объекты представляют собой ненасыщенные по водороду соединения, которые активно рассматриваются в качестве перспективных систем для его аккумулирования. Изучение же обозначенных реакций и получение обширного набора термодинамических и термохимических данных (энタルпий реакций, энталпий образования, энタルпий парообразования, констант реакций и пр.) с привлечением комплекса экспериментальных, теоретических и эмпирических методов призваны помочь в решении проблем транспортировки, хранения и использования водорода. Таким образом, решаемая в рамках представленной работы задача имеет не только фундаментальную, но и, безусловно, практическую значимость для связанных с альтернативными источниками энергии областей промышленности.

Проведенное автором систематическое физико-химическое исследование ряда поли- и гетероциклических соединений, а также аминоспиртов позволило **Марии Евгеньевне**:

- впервые изучить реакции гидрирования и дегидрирования поли- и гетероциклических ароматических соединений, определить равновесные составы, константы равновесия, термодинамические характеристики энталпии и энтропии реакций в широком интервале температур;

- предложить комбинированный подход к изучению равновесия целевых реакций, использующий экспериментальные и квантово-химические методы, который позволяет осуществлять эффективный поиск кандидатов в носители водорода;

- с использованием калориметрии и метода переноса получить внушительный набор экспериментальных данных по жидкофазным энталпиям образования и энталпиям парообразования;

- показать возможность использования композитных квантово-химических методов с целью оценки константы равновесия и термодинамических характеристик реакций гидрирования-дегидрирования в газовой фазе.

Автореферат включает описание четырех глав, которые содержат основные результаты работы, заключение и список опубликованных статей и тезисов докладов. Результаты проведенных автором исследований в полном объеме отражены в пяти печатных работах соискателя, которые опубликованы в журналах, соответствующих требованиям ВАК РФ к ведущим рецензируемым научным журналам, и апробированы на российских и международных конференциях высокого уровня.

По представлению данных и оформлению реферата имеются вопросы и незначительные замечания:

- Текст автореферата изобилует грамматическими и пунктуационными опечатками (например, первое предложение в актуальности «Зависимость современной энергетической и транспортной системы от ископаемых видов топлива влечет за собой две серьезные проблемы: неблагоприятные последствия для окружающей среды, связанные с выбросами углекислого газа, и быстрая истощаемость запасов сырья», «Молекула водорода, с учетом ее чрезвычайно высокой энергоемкости, безусловно является наиболее перспективным энергоносителем», «поскольку они позволяет использовать существующую инфраструктуру для жидкого топлива и обладает высокой емкостью хранения водорода», класс соединений аминоспирты необходимо писать слитно и т.д.), а также стилистическими ошибками и неудачными выражениями (например, «переход... сталкивается с серьезными проблемами,

связанные с внедрением в производство, которые невозможno решить без тщательного термодинамического анализа», «Серьезной проблемой на пути использования $H_2\dots$ », «Оптимизацию и внедрение данных новых технологий...», «энталпия реакции R-IV (табл.1) теоретически ожидается быть термонейтральной», «Уравнения химических реакций, для которых изучалось были получены тепловые эффекты представлены на рис. 1.» и т.д.).

- Не очень понятно выражение «емкость хранения водорода» (раздел «Актуальность работы»). Не мог бы автор дать определение ему? Имеет ли это определение формульное выражение?

- В таблице 11 автор приводит экспериментальные данные и результаты квантово-химических расчетов, полученные при повышенных температурах и при 298.15 K, соответственно, в ходе исследования химического равновесия в системе флуоронтена. Автор утверждает, в основном эти данные находятся в согласии и входят в пределы погрешностей определения. Однако, это не так. В большинстве случаев (реакции R-I, R-IV, R-V, R-VII) теоретические значения энталпий реакций ниже экспериментальных (как и в случае 2-этиламиноэтанола, таблица 12). Вероятнее всего, в случае молекул с большим количеством ароматических колец (в отличие от всех остальных изученных систем) температурное изменение теплоемкостей продуктов гидрирования и дегидрирования существенно и должно учитываться при проведении сравнения величин, относящихся к разным температурам. Но в таком случае непонятна причина совпадения экспериментальных и теоретических значений в случае остальных трех реакций. Может ли автор объяснить, с чем связаны расхождение/совпадение данных в таблице 11?

Сделанные замечания и заданные вопросы не затрагивают основных результатов и выводов работы, а также ее научную значимость. Работа выполнена на высоком профессиональном научном уровне и представляет собой законченное научное исследование. Полученные результаты не вызывают сомнений в их достоверности и открывают новые возможности к поиску и исследованию перспективных жидкых носителей водорода. Все положения, выносимые на защиту, подтверждаются результатами проведенных исследований. Выводы полностью соответствуют материалу, представленному в реферате.

Автореферат позволяет сделать заключение, что по своему объему, новизне, научной и практической значимости результатов диссертационная работа Конновой Марии Евгеньевны «Термодинамика полилипидических ароматических и азотсодержащих гетероциклических соединений - перспективных носителей водорода» полностью **соответствует требованиям**, установленным п.п. 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г. (редакции от 01.08.2018 г. с изм. от 26.05.2020), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук, а её автор Коннова Мария Евгеньевна **заслуживает** присуждения искомой степени **кандидата химических наук** по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Даю согласие на обработку моих персональных данных.

Кандидат химических наук по специальностям
02.00.01 – неорганическая химия и 02.00.04 – физическая химия
старший научный сотрудник лаборатории химии летучих
координационных и металлоганических соединений
ФГБУН ИНХ СО РАН им. А.В. Николаева,
630090 г. Новосибирск, пр. акад. Лаврентьева, д. 3,
тел. 8(383)330-95-56 (раб.),
e-mail: ksenia@niic.nsc.ru

Жерикова Ксения Васильевна

