

## 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

Диссертационная работа Конновой Марии Евгеньевны посвящена решению крайне актуальной проблемы поиска новых материалов для безопасного хранения и транспортировки водорода с целью его дальнейшего использования в качестве альтернативного источника энергии. Объектами исследования данной работы являются перспективные полициклические ароматические и гетероциклические соединения, а также амино-спирты, хранение и высвобождение водорода в которых реализуется за счет обратимой реакции каталитического гидрирования-дегидрирования. Актуальность выбранной темы и объектов исследования убедительно аргументированы во введении и не вызывают сомнения. Автором был получен и систематизирован обширный набор термодинамических и термохимических характеристик с использованием широкого круга экспериментальных и расчетных методов, что, в частности, позволило детально исследовать различные стадии процесса гидрирования исследуемых соединений, определить константы равновесия и энтальпии реакций, выявить важные закономерности между молекулярной структурой субстрата и термодинамическими параметрами реакции, а также процессами фазовых переходов. Безусловным достоинством данной работы является хорошая взаимная согласованность численных значений термохимических параметров, полученных с использованием альтернативных экспериментальных и теоретических подходов, что указывает на высокую надежность представленных соискателем термодинамических данных. Результаты диссертации будут способствовать решению фундаментальных задач в области получения новых и подтверждения уже известных закономерностей «структура-свойство» для исследованных классов органических соединений. Также нельзя не отметить очевидный прикладной аспект данной работы, который заключается в разработке рационального подхода поиска оптимального накопителя водорода и подбора оптимальных условий для внедрения систем на основе жидких органических носителей в химическую технологию.

Материалы диссертации хорошо апробированы, доложены на солидных международных и всероссийских конференциях и изложены в 5 статьях, опубликованных в журналах, входящих в международные базы научного цитирования Web of Science и Scopus и в Перечень изданий, рекомендованных ВАК Российской Федерации для публикации материалов кандидатских диссертаций.

Автореферат написан хорошим, профессиональным языком, легко читается и воспринимается. Тем не менее, по автореферату имеются следующие вопросы и небольшие замечания:

1. Согласно значениям констант равновесия, приведенным на рисунке 2, реакции гидрирования в выбранных экспериментальных условиях являются термодинамически неблагоприятными. Каков выход данных реакций?
2. Какова погрешность в определении констант равновесия, показанных на рисунке 2? Учитывалась ли данная погрешность при расчете энтальпий реакции?
3. В большинстве таблиц, представленных в автореферате, автор использует расширенные погрешности. Это предполагает оценку суммарной стандартной неопределенности результатов экспериментальных измерений с учетом веса случайных и известных факторов неопределенности. Из текста автореферата не ясно каким образом был проведен такой анализ экспериментальных погрешностей. Кроме того, в таблице 2 погрешности при экспериментальных величинах выражены как двойное стандартное отклонение, тогда как во

всех остальных таблицах с термодинамическими характеристиками – как расширенные погрешности. Причина использования различных методов оценки экспериментальных погрешностей, в данном случае, не очевидна.

Также в тексте присутствует небольшое количество стилистических, грамматических ошибок и неточностей:

Стр. 9. «Уравнения химических реакций, для которых изучалось были получены тепловые эффекты представлены на рис. 1.»

Стр. 10. На правом графике рисунка 2 пропущен нижний индекс при константе.

Стр. 11. Автор ошибочно ссылается на таблицу 2 при упоминании энтальпий реакции гидрирования.

В таблицах встречаются следующие нерасшифрованные сокращения: «E», «(cr)», «(liq)», «HR», «HL».

Ссылки на таблицы в тексте даны как «табл.» и «таблица». Хотелось бы единообразия.

Стр. 15. В подписи к рисунку 6 допущена ошибка в нумерации реакций гидрирования 1-изопропил-индола.

Стр. 18. «Такое значения значительно выше...»

Стр. 21. Вывод 1. «Показано, что результаты по энтальпиям реакций, измеренные с помощью метода химического равновесия...». Строго говоря, энтальпии реакций были рассчитаны из температурных зависимостей констант равновесия, а не измерены каким-либо прямым методом.

Стр. 21. Вывод 4. «газохроматографическим методом». Очевидно, имеется в виду «газохроматографический метод».

Указанные выше замечания не являются принципиальными, не вступают в противоречие с основными положениями диссертации, не ставят под сомнение достоверность полученных результатов и не снижают ценности выполненных исследований в целом. Диссертационное исследование Конновой Марии Евгеньевны «Термодинамика полициклических ароматических и азотсодержащих гетероциклических соединений - перспективных носителей водорода» представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая по актуальности, научному уровню проведенных исследований, новизне и значимости полученных результатов, личному вкладу автора полностью соответствует критериям, предъявляемым к диссертациям на соискание степени кандидата химических наук в соответствии с пунктами 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 в действующей редакции, а ее автор, Коннова Мария Евгеньевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

16 января 2023 г.

Суров Артем Олегович  
кандидат химических наук,  
старший научный сотрудник

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук (ИХР РАН), отдел разработки новых фармацевтических форм лекарственных соединений и материалов биомедицинского назначения.

Адрес: 153045, г. Иваново, ул. Академическая, д.1  
Телефон: +79203456609  
E-mail: aos@isc-ras.ru

