

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Мельникова Игоря Никитича "Кинетика и механизм термического разложения нитро и нитраминопроизводных гетероциклических соединений по данным термического анализа и высокоточных квантовохимических расчетов", представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Поиски новых энергоемких соединений, превосходящих по эффективности известные, и изучение их свойств являются актуальными задачами и непрерывно ведутся во всех промышленно развитых странах.

В представленной диссертационной работе методами термического анализа изучены закономерности термического разложения некоторых гетероциклических нитропроизводных (BCHMX, DINGU, TNGU, DNTP и DBT). Предложены кинетические модели, описывающие процессы термоллиза. С помощью квантово-химических расчетов оценены различные потенциально возможные механизмы термораспада и выбраны наиболее вероятные каналы разложения. Высокоточными квантово-химическими методами найдены энтальпии образования рассматриваемых соединений в газовой фазе и проведена оценка их теплот сублимации корреляционными методами, что позволяет найти важную для практики энтальпию образования в твердой фазе. Полученные результаты представляют научный и практический интерес. По теме диссертации опубликовано 15 работ, в том числе 4 статьи в авторитетных зарубежных научных журналах.

Замечания и вопросы по автореферату диссертационной работы:

Термическое разложение DINGU и TNGU в твердой фазе диссертант описывает топохимическими моделями. Однако топохимическое термическое разложение сильно зависит от предыстории образца (т.е. от количества дефектов в кристаллической решетке). О том, как готовились образцы исследуемых веществ, изучались ли вообще образцы, полученные в других условиях кристаллизации, в автореферате, к сожалению, ничего не сказано.

Вызывают вопросы значения теплот сублимаций DINGU и TNGU. В свое время, энтальпии образования этих соединений в твердой фазе были надежно определены по экспериментальным калориметрическим данным в лаборатории Ю.Н. Матюшина в институте Химической физики им Н.Н. Семёнова РАН (сейчас Федеральный исследовательский центр, в котором работает диссертант). Вызывает удивление, почему не были использованы эти данные для нахождения теплот сублимаций? Полученные значения

будут заметно отличаться от значений, найденных диссертантом по корреляционным уравнениям. К тому же они находятся в явном противоречии (в отличие от данных из эксперимента) с некоторыми наблюдаемыми физико-химическими свойствами веществ.

"Режет глаз" неправильное написание названий веществ "...гликолурил", вместо "...гликольурил". Причем это не опечатка (которые тоже имеются, например, вместо "динитро", написано "диниро"), а систематическая ошибка написания для всех производных гликольурила.

Высказанные замечания и вопросы не умаляют основных достижений и не изменяют общего хорошего впечатления, оставляемого работой.

Считаю, что представленная диссертационная работа по своей практической значимости, новизне результатов и актуальности удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям (п. 9 «Положение о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842), а ее автор, Мельников Игорь Никитич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

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

Астахов Александр Михайлович

кандидат химических наук (специальность 02.00.04 – физическая химия),
доцент кафедры Химической технологии твердых ракетных топлив, нефтепродуктов и полимерных композиций Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования "Сибирский государственный университет науки и технологий им. ак. М.Ф. Решетнёва" (СибГУ им. М.Ф. Решетнёва),
660049, г. Красноярск, пр. Мира, 82.

Тел.: +7(923)270-49-75 E-mail: alexastachov@mail.ru

04.06.2026

Подпись Астахова А.М. заверяю
Проректор по научной работе
к.т.н., доцент



П.Г. Колесников