

## 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

Создание новых энергетических материалов (ЭМ), сочетающих высокую энергоемкость с термической стабильностью и низкой чувствительностью к внешним воздействиям, остается **актуальной** задачей современной химической физики и материаловедения. Детальное изучение кинетики и механизма термического разложения перспективных гетероциклических C- и N-нитросоединений (BCHMX, DINGU, TNGU, DNTP, DBT) имеет фундаментальное значение для понимания элементарных стадий инициирования горения и взрыва, а также критически важно для обеспечения безопасности их хранения, транспортировки и применения. Автореферат отражает работу, направленную на решение этой актуальной научно-прикладной проблемы, что полностью отвечает современным вызовам в области энергетики и безопасности.

Научные достижения диссертанта обладают **высокой степенью новизны и научно обоснованы** экспериментальными данными и результатами расчетов. В работе впервые реализован комплексный подход, объединяющий современные методы термического анализа и высокоточные квантовохимические расчеты. Среди новых результатов, полученных в работе, стоит выделить следующие:

- впервые построены формально-кинетические модели термического разложения на основе совместной обработки изотермических и неізотермических данных, полученных методами ТГА и ДСК, что позволило существенно расширить температурные интервалы прогнозирования;
- с использованием локальных модификаций метода связанных кластеров DLPNO-CCSD(T) достоверно установлены первичные каналы разложения исследуемых ЭМ (радикальный разрыв связей N–NO<sub>2</sub>/C–NO<sub>2</sub> и нитро-нитритные перегруппировки);
- впервые выявлен и количественно охарактеризован кинетически значимый вторичный канал разложения нитраминов – бимолекулярная реакция первичного аминильного радикала с исходной молекулой;
- впервые получены достоверные значения энтальпий образования (в газовой и конденсированной фазах) и энтальпий сублимации/испарения для всего ряда исследованных соединений.

**Достоверность** полученных результатов обеспечивается применением сертифицированного термоаналитического оборудования (ДСК/ТГА, ДСК высокого давления), использованием апробированных методов термокинетического моделирования (изоконверсионный метод Фридмана, нелинейная регрессия с оптимизацией моделей), а также применением современных высокоточных квантовохимических методов (DLPNO-CCSD(T), W1-F12/W2-F12), обеспечивающих точность расчетов, сопоставимую с экспериментальной. Результаты критически проанализированы, сопоставлены с независимыми литературными данными, а выводы подтверждаются статистической обработкой экспериментальных данных. Публикационная активность (4 статьи в рецензируемых журналах Q1/Q2, более 10 докладов на международных и всероссийских конференциях) служит дополнительным свидетельством научной достоверности и признания результатов экспертным сообществом.

Работа имеет существенную **теоретическую и практическую значимость**. Теоретическая значимость заключается в расширении фундаментальных представлений о механизмах термического разложения гетероциклических энергетических соединений, а также в уточнении поверхностей потенциальной энергии (ППЭ) и кинетических параметров элементарных стадий. Практическая значимость определяется возможностью использования разработанных кинетических моделей для прогнозирования термической стабильности и безопасных условий эксплуатации перспективных ЭМ, а также использования полученных термохимических констант при построении детальных моделей горения и взрывчатого превращения.

Автореферат написан грамотным, **четким научным языком**. Стиль изложения строго соответствует академическим стандартам: терминология использована корректно, структура текста логична, формулировки целей, задач, новизны и выводов сформулированы конкретно и однозначно. Материал изложен последовательно, без избыточности, с оптимальным соотношением текстовой и иллюстративной информации. Замечаний к языковому и стилистическому оформлению нет.

**Содержание автореферата** полностью отражает структуру и основные результаты диссертационной работы. Работа включает введение, литературный обзор, описание методик, результаты экспериментальных и теоретических исследований, их обсуждение, а также сформулированные выводы. Диссертация соответствует паспорту научной специальности 1.3.17 «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» и затрагивает пункты 1, 2, 5, 6, 7, касающиеся механизмов химических превращений, строения и реакционной способности интермедиатов, поверхностей потенциальной энергии, а также связи химической природы веществ с их термохимическими параметрами и характеристиками термического разложения. Объем работы (152 стр., 58 рис., 20 табл., 278 источников), количество и качество публикаций, а также степень апробации результатов свидетельствуют о том, что диссертация является законченным самостоятельным научным исследованием.

Замечания по сути работы отсутствуют. При прочтении исключительно редко можно встретить опечатки (например, на 3 стр. автореферата опечатка присутствует в названии объекта исследования 1,4-динитрогликольурилы). К содержанию диссертации, структуре автореферата, оформлению библиографических ссылок и представлению результатов замечаний не имеется.

Диссертационная работа И.Н. Мельникова представляет собой законченное самостоятельное научное исследование. Работа **соответствует** действующему Положению о порядке присуждения ученых степеней (Постановление Правительства РФ № 842), а соискатель, 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.

Галухин Андрей Владимирович,

Кандидат химических наук по специальности 1.4.3. Органическая химия, доцент кафедры физической химии Химического института им. А.М. Бутлерова ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет» 420008, Россия, г. Казань, ул. Кремлёвская, д. 18  
e-mail: and\_galuhin@mail.ru  
Тел. +7 (917) 275-84-04

01.06.2026 г.

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

