

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

На отзыв представлены результаты исследования глобальных кинетических моделей и эффективные параметры термического разложения (энергии активации и предэкспоненциальные множители) растворов, расплавов и твердофазного термолиза высокоэнергетических гетероциклических соединений (BCHMX, DINGU, TNGU, DNTP, DBT), установленные при помощи термокинетического моделирования по данным дифференциальной сканирующей калориметрии и термогравиметрии. Результаты работы подкреплены высокоточными квантово-химическими расчетами энергий связей и активационных барьеров элементарных реакций разложения в газовой фазе и модельных растворах, позволяющие устранить существующие в литературе противоречия относительно первичных реакций разложения рассмотренных соединений. Так же проведены квантово-химические расчеты вторичных каналов их разложения, позволяющие установить ранее не обсуждавшийся в литературе вторичный процесс термолиза нитраминов – бимолекулярные реакции первичных аминильных радикалов с исходной молекулой нитрамина. Выявлен наиболее точный эмпирический метод оценки энтальпии сублимации.

В работе сформулированы амбициозные цели - определение кинетики и механизма термического разложения и термодимических параметров ряда перспективных гетероциклических С- и N-нитросоединений. Поставленные цели вполне соотносятся с достигнутыми результатами.

Полученные результаты свидетельствуют об успешной реализации целей, сформулированных при планировании работы, автором продемонстрирована глубина знаний в области экспериментального подхода и теоретического метода расчета механизмов термического разложения. В итоге работа получилось полезной, актуальной и новаторской.

Материалы диссертации опубликованы в 4 печатных работах и в 11 тезисах конференций.


Автореферат содержит незначительные грамматические ошибки (например ниро, вместо нитро), что не влияет на научную значимость работы. Из работы так же не совсем ясна необходимая точность определения термодинамических параметров (энтальпий сублимаций).

Полагаю, что представленная на отзыв работа в полной мере отвечает требованиям, предъявляемым ВАК и кандидатским диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества, а Мельников Игорь Никитич достоин присуждения искомой степени.

Хакимов Дмитрий Викторович

Старший научный сотрудник Лаборатории
молекулярного моделирования и направленного
синтеза (№44) ФГБУН ИОХ РАН

Кандидат химических наук по специальности
02.00.04 Физическая химия


01.06.2026

Подпись к.х.н. Д.В. Хакимова заверяю
Ученый секретарь ИОХ РАН, к.х.н.



 /И.К. Коршевец/

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