

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Мельникова И.Н.

«Кинетика и механизм термического разложения нитро и нитраминопроизводных гетероциклических соединений по данным термического анализа и высокоточных квантовохимических расчетов»

Диссертационная работа посвящена исследованию кинетики и механизма термического разложения ряда перспективных гетероциклических С- и N-нитросоединений, а также определению их термохимических характеристик с использованием современных экспериментальных и высокоточных квантово-химических методов. Работа выполнена на актуальную тему, связанную с разработкой и исследованием энергетических материалов, обладающих высокими энергетическими характеристиками, термической стабильностью и приемлемым уровнем чувствительности.

Актуальность исследования не вызывает сомнений. Разработка новых энергетических материалов требует глубокого понимания механизмов термического разложения, кинетики реакций и термохимических параметров. Особую значимость приобретает использование высокоточных квантово-химических методов и современных методов термокинетического анализа для прогнозирования свойств перспективных соединений до их широкого экспериментального изучения.

Научная новизна работы заключается в том, что автором впервые получены детальные кинетические модели термического разложения ряда энергетических соединений, исследованы механизмы первичных и вторичных стадий термолиза, выполнены высокоточные расчёты поверхностей потенциальной энергии и определены термохимические характеристики исследуемых веществ. Особо следует отметить применение современных методов DLPNO-CCSD(T), W1-F12 и W2-F12, обеспечивающих высокую достоверность расчетных результатов.

Полученные результаты обладают высокой степенью достоверности, что обеспечивается использованием современных методов дифференциальной сканирующей калориметрии, термогравиметрического анализа, а также применением высокоуровневых квантово-химических методов. Автором проведено сопоставление полученных результатов с литературными данными, что подтверждает корректность и обоснованность сделанных выводов.

Практическая и теоретическая значимость работы состоит в том, что полученные данные могут быть использованы при разработке новых энергетических материалов, прогнозировании их термической стабильности и построении детальных механизмов горения и разложения. Результаты исследования представляют интерес для специалистов в области химической физики, физической химии, квантовой химии и химии высокоэнергетических соединений.

Автореферат написан грамотным научным языком, хорошо структурирован и логически последовательно изложен. Иллюстративный материал и табличные данные способствуют лучшему восприятию результатов работы.

По содержанию автореферата имеются отдельные замечания, не снижающие общей высокой оценки диссертационной работы:

1. В ряде разделов было бы полезно более подробно обсудить влияние конденсированной фазы на механизмы разложения исследуемых соединений.
2. Желательно расширить обсуждение связи между расчетными термохимическими характеристиками и чувствительностью энергетических материалов.
3. В отдельных случаях следовало бы подробнее сопоставить результаты с современными зарубежными исследованиями.

Отмеченные замечания носят дискуссионный характер и не влияют на общую положительную оценку выполненного исследования.

Диссертационная работа представляет собой завершённое научно-квалификационное исследование, выполненное на высоком

