

## ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

о работе Мельникова Игоря Никитича по кандидатской диссертации «Кинетика и механизм термического разложения нитро и нитраминопроизводных гетероциклических соединений по данным термического анализа и высокоточных квантовохимических расчетов», представляемой на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

К совместной работе с Игорем Никитичем Мельниковым мы приступили около семи лет назад. Основное направление его научной деятельности – теоретическое и экспериментальное исследование кинетики термического разложения гетероциклических высокоэнергетических соединений. За время работы Игорь стал высококвалифицированным специалистом как в области экспериментальных термоаналитических методов, так и в области современных высокоточных квантовохимических расчетов. В ходе диссертационной работы соискателем проделан большой объем квантовохимических расчетов высокого уровня, требующих высокой квалификации. Он освоил широкий набор современных методов высокоточных термодинамических и кинетических расчетов (например, явно коррелированных и локальных модификаций метода связанных кластеров). Игорь является соавтором более десяти научных публикаций, результаты данной диссертационной работы изложены в четырех статьях, опубликованных в рецензируемых международных научных журналах, причем в трех из них он является первым автором. Он лично провел все эксперименты и расчеты, обсуждаемые в работах, построил кинетические модели, описывающие экспериментальные результаты, принимал активное участие в обсуждении и интерпретации результатов экспериментов и расчетов и формулировке выводов. Игорь неоднократно участвовал в работе крупных и представительных международных и всероссийских конференций и школ. Помимо многочисленных стипендий, премий и дипломов молодежных конференций, его успехи отмечены Стипендией Президента РФ для аспирантов и молодых ученых. Также он неоднократно участвовал в качестве ответственного исполнителя в проектах, поддержанных РНФ.

Представленная И.Н. Мельниковым диссертация посвящена исследованию кинетики и механизма термического разложения ряда перспективных энергетических гетероциклических С- и N-нитросоединений. Информация о механизме термического разложения и константах скорости элементарных стадий важна как для моделирования свойств уже существующих энергетических материалов (ЭМ) и их усовершенствования, так и для предсказания свойств новых материалов и отбора наиболее перспективных из них для

дальнейшего изучения. В силу энергетической природы данных веществ, экспериментальное исследование кинетики их разложения естественным образом затруднено. Квантовохимические расчеты являются незаменимым инструментом в данной области и эффективно дополняют термоаналитический эксперимент.

В рамках работы аспиранта с помощью высокоточных квантовохимических расчетов и современных методик термического анализа были исследованы первичные процессы термического разложения ряда энергетических гетероциклических соединений: 1,3,4,6-тетранитрооктагидроимидазо[4,5-d]имидазола (BCHMX), 1,4-динитрогликолурила (DINGU), 1,3,4,6-тетранитрогликолурила (TNGU), 6,8-динитро-[1,2,4]триазоло[1,5-a]пиридина (DNTP) и 5,7-динитробензотриазола (DBT). Соискатель провел большую экспериментальную работу, например, им впервые предложены кинетические модели, для построения которых использованы совместные данные сигналов ТГА и ДСК, полученные в изотермических и неизотермических условиях. С использованием современных количественных квантовохимических методов были установлены первичные реакции разложения всех исследуемых соединений, рассчитаны их активационные барьеры и константы скорости. Были достоверно определены энергии связей N-NO<sub>2</sub> и C-NO<sub>2</sub> и первичные высокотемпературные процессы термолитического разложения в газовой фазе BCHMX, нитрогликолурилов DINGU и TNGU, а также DNTP и DBT. Для двух последних соединений установлены изокинетические температуры конкурирующих радикальных (разрыв C-NO<sub>2</sub> связи) и молекулярных (нитро-нитритная перегруппировка) каналов разложения. Впервые рассмотрены вторичные каналы разложения BCHMX, DINGU и TNGU. Установлено, что бимолекулярная реакция первичного радикального продукта с исходной молекулой нитрамина является наиболее вероятным путем вторичных реакций термолитического разложения. Кроме того, были протестированы эмпирические и полуэмпирические методы оценки термодинамических параметров энергетических материалов и рекомендованы методы высокоскоростного скрининга новых ЭМ, оптимальные по соотношению вычислительных затрат и точности. Также с помощью комбинации расчетных и экспериментальных методов определены достоверные значения энтальпии образования исследуемых соединений в газовой и конденсированной фазах. В целом, представлена работа серьезного объема и глубины, позволяющая заметно продвинуться в понимании деталей термического разложения энергетических гетероциклов.

Из всего перечисленного ясно, что И.Н. Мельников зарекомендовал себя очень хорошо подготовленным, инициативным и самостоятельным аспирантом. Выполненный объем исследований свидетельствует также о его трудолюбии и ответственном отношении к поставленным задачам. Считаю, что диссертационная работа Игоря Никитича

Мельникова является цельным научным исследованием, соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 1.3.17 «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества», а сам И.Н. Мельников заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук.

Научный руководитель  
Кандидат физико-математических наук,  
с.н.с. лаборатории квантовой химии и  
компьютерного моделирования  
Федерального государственного бюджетного  
учреждения науки Институт химической  
кинетики и горения им. В.В. Воеводского  
Сибирского отделения  
Российской академии наук  
ул. Институтская 3, 630090 Новосибирск,  
Россия

Киселев Виталий Георгиевич

Тел.: (383) 333-33-48

Эл. почта: [vitaly.kiselev@kinetics.nsc.ru](mailto:vitaly.kiselev@kinetics.nsc.ru)

20 марта 2026 г.

Подпись Киселев В.Г. удостоверяю



Заместитель секретаря  
ИХКГ СО РАН  
к.ф.-м.н.  
Лыряева А.П.