

Отзыв

на автореферат диссертационной работы 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»

Работа Мельникова И.Н. посвящена актуальной проблеме разработки безопасных и в то же время эффективных энергетических материалов. Детальное изучение кинетики и механизмов их термического разложения имеет критическое значение для обеспечения безопасности при хранении, транспортировке и промышленном применении таких материалов, а также может помочь при построении физико-химических моделей их горения и взрыва. Работа также пытается решить актуальную проблему данной области — поиск надёжных упрощённых вычислительных протоколов для прогнозирования свойств перспективных энергетических материалов.

Хочется особо отметить фундаментальность и масштаб проведенного исследования. Автор самостоятельно, в рамках одной диссертации, охватил полный цикл изучения пяти сложных гетероциклических соединений: от постановки термоаналитических экспериментов (включая элегантное использование ДСК высокого давления для подавления испарения) до трудоемких квантовохимических расчетов поверхностей потенциальной энергии высокоточными современными методами. Такое сочетание экспериментальных и теоретических методов обеспечивает высокую степень обоснованности полученных результатов и выводов работы.

Отдельного внимания и высокой оценки заслуживает пятая глава диссертации, в которой автор провёл валидацию современных методов на основе машинного обучения (AIQM1) и ряда эмпирических подходов.

Один из наиболее интересных результатов работы – обнаружение низкобарьерного бимолекулярного механизма переноса водорода. Автор показывает, что при низких температурах и высоких концентрациях (соответствующих плотности кристалла) доминирует найденный им бимолекулярный канал, а при высоких температурах или в разбавленных растворах начинает преобладать мономолекулярный распад первичного радикала. Это объясняет, почему кинетические параметры, полученные в растворе и в твердой фазе, могут различаться.

В процессе чтения автореферата у меня возник вопрос:

— может ли учет эффектов туннелирования протонов и ангармоничности колебаний для протонного переноса в обнаруженном вами бимолекулярном механизме существенно изменить расчетные константы скорости и эффективные энергетические характеристики этого канала?

Работа Мельникова И.Н. интересна тем, что не просто сравнивает эксперимент и теорию, а выстраивает прочный методологический мост между макроскопическим формально-кинетическим описанием и микроскопическим механистическим пониманием элементарных стадий процесса.

Текст автореферата написан ясным и строгим научным языком, но, к сожалению, содержит опечатки. Например, «динирогликолурил» на стр. 3 и 13 автореферата и «в тоже время ...» на стр. 10 и далее. Стремясь получить более полное представление о работе, я ознакомилась с полным текстом диссертации, в котором также обнаружилось некоторые технические недочеты в оформлении: ошибки в верстке математических формул, из-за которых некорректно отображаются некоторые специальные символы (например формулы 32-35 на стр. 38 и 39 и т.п.). Тем не менее, указанные замечания носят исключительно технический характер. Они ни в коей мере не умаляют высокого научного уровня проведенного исследования, достоверности полученных кинетических и термодинамических данных, а также общей значимости результатов работы.

В целом, считаю, что диссертационная работа Мельникова Игоря Никитича «Кинетика и механизм термического разложения нитро и нитраминопроизводных гетероциклических соединений по данным термического анализа и высокоточных квантовохимических расчетов» полностью соответствует требованиям п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 (в действующей редакции), а ее автор, Мельников Игорь Никитич, заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

Мирзаева Ирина Валерьевна

к.ф.-м.н., специальность 02.00.04 – физическая химия,

старший научный сотрудник Лаборатории физической химии конденсированных сред
Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук (ИНХ СО РАН)


630090, Новосибирск, Проспект Академика Лаврентьева, 3

<http://www.niic.nsc.ru>

Тел.: (383) 330-75-31

Эл. почта: ldrebus@niic.nsc.ru

08.06.2026

 /И.В. Мирзаева/

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

