

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Барабошкина Никиты Михайловича
*«Теоретический дизайн в направленном синтезе
энергоемких полиазотных сокристаллов»*,
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук
Специальность 1.4.4 – *физическая химия*

Тема диссертационной работы Н.М. Барабошкина представляет интерес не только для специалистов в области энергоемких соединений, но и большинству исследователей, занимающихся изучением свойств кристаллов органических соединений и их сокристаллов, например, лекарственных препаратов, нелинейнооптических материалов и др. В этой связи выполненное исследование является актуальным и практически значимым.

Работа посвящена задачам и их решению в области энергоемких полиазотных композиций. Известно, что современные энергоемкие композиции должны обладать высокой степенью безопасности (как технологической, так и эксплуатационной) и одним из возможных подходов к решению проблемы получения ЭМ с приемлемой чувствительностью к механическим воздействиям является их сокристаллизация. Сокристаллизация энергоемких соединений, во многих случаях, позволяет снизить чувствительность композиции, в целом, если один из компонентов обладает пониженной чувствительностью.

Целью данной работы и явилось выявление взаимосвязей между структурой и способностью энергоемких полиазотов к их сокристаллизации. В качестве базовых соединений диссертантом взяты два хорошо известных полиазотных соединения - бензотрифуроксан и фуразанотетразиндиоксид, для которых в работе был выполнен структурный поиск их оптимальных кристаллических упаковок и далее получено несколько новых сокристаллизатов, исследованных далее с использованием методов анализа: РСА, ДСК, ИК-спектроскопия, а также с оценкой чувствительности веществ к механическим воздействиям.

Научная новизна диссертации состоит в том, что автором оптимизированы методики моделирования сокристаллических упаковок энергоемких соединений на основе метода Атом-Атомных потенциалов и квантовой химии и спрогнозирована возможность их получения с оценкой перспектив их использования расчетом их физико-химических и эксплуатационных свойств.

Впервые на основе моделирования были получены ФТДО-бензол (1:1), БТФ-ФТДО (1:3), БТФ-нитробензол (1:1), БТФ-1,3-динитробензол (1:1), БТФ-1,4-динитробензол (3:1) и оценены энтальпии сублимации, образования и энергии сокристаллизации. Теоретически определена кристаллическая упаковка сольвата БТФ-бензол (1:1).

Опробованная автором методика позволяет производить оценку физико-химических свойств полиазотных соединений и их сокристаллов до их синтетического получения, что позволяет выбрать наиболее перспективные, целевые соединения. Таким образом, можно заключить, что совокупность теоретических и прикладных методов диссертации по заявленной теме позволяет решать научные и прикладные задачи

в области энергоемких материалов, что имеет существенное значение для развития оборонно-промышленных технологий.

Из замечания следует отметить следующие:

- (1) Не вполне понятен выбор соединений нитроароматического ряда в качестве конформеров базовых полиазотов.
- (2) Выбор в качестве критерия возможности сокристаллизации отрицательного значения энергии этого процесса не является бесспорным: эндотермические процессы широко известны в химии. Безусловным критерием здесь явилось бы уменьшение энтропии сокристаллизации, когда процесс термодинамически запрещен.

В целом, Автореферат представляет полноценную научно-исследовательскую работу, выполненную автором самостоятельно на высоком научном уровне. Диссертационная работа **Барабошкина Никиты Михайловича** по поставленным задачам, качеству и эффективности их решения, актуальности и научной новизне, безусловно, удовлетворяет требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям (п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. №842), а ее автор – **Барабошкин Н.М.** заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности **1.4.4 – Физическая химия.**

главный научный сотрудник, и.о. зав. Лабораторией термодинамики
высокотемпературных процессов ФИЦ ПХФ и МХ РАН,
к.х.н.



/Лемперт Давид Борисович/

8(49652) 2-25-95
lempert@icp.ac.ru

Собственноручную подпись

сотрудника

УДОСТОВЕРЯЮ

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, проспект акад. Семенова, д.1, г. Черноголовка, Московская обл., 142432
+7 (495) 993-57-07, office@icp.ac.ru

Подпись Д.Б. Лемперта заверяю: