

Акционерное Общество
«Корпорация «Тактическое Ракетное Вооружение»



Акционерное общество
«Государственный научно-исследовательский институт машиностроения имени В.В.Бахирева»
(АО «ГосНИИмаш»)

пр. Свердлова, д.11А, г. Дзержинск, Нижегородская обл., Россия, 606002
Телетайп: 151617 КЛИН; тел.: +7 (8313) 36-70-00;
факс: +7 (8313) 36-08-30, +7 (8313) 36-71-00;
E-mail: niimash@mts-nn.ru, www.gosniimash.ru
ОКПО 07512007 ОГРН 1085249000650 ИНН/КПП 5249093130/524901001

УТВЕРЖДАЮ
Заместитель генерального директора
по научной работе -
Первый заместитель
генерального директора,
кандидат технических наук

Г.В.Харин
« 08 » 2022г.



ОТЗЫВ

на автореферат диссертации

Барaboшкина Никиты Михайловича

на тему «Теоретический дизайн в направленном синтезе энергоёмких полиазотных сокристаллов», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

Традиционные способы повышения мощности энергетических материалов состоят в увеличении плотности монокристалла, повышении энтальпии и создании химических структур со сбалансированным соотношением горючих и окисляющих элементов. Следует отметить, что для индивидуальных веществ рост концентрации энергии в молекуле ведет к снижению физической и химической стабильности, и, как следствие, к повышению чувствительности веществ к внешним воздействиям.

Одним из возможных подходов к решению проблемы получения энергетических материалов с приемлемой чувствительностью к механическим воздействиям является сокристаллизация. Несмотря на успехи в создании высокоэнергетических сокристаллов, в настоящее время не установлено закономерностей между строением индивидуальных соединений и особенностями их кристаллической упаковки в сокристаллах. В связи с этим задача моделирования строения полиазотных сокристаллов для выявления закономерностей их образования является **актуальной**.

Научная новизна диссертационной работы Барaboшкина Н.М. заключается в следующем:

1. На основе метода Атом-Атомных потенциалов разработан подход к

моделированию кристаллического строения соединений и оценке физико-химических характеристик полиазотных энергоёмких сокристаллических форм. Рекомендованы модели молекулярно-электростатического потенциала, оптимизированные для использования в качестве анизотропных моделей зарядов молекул.

2. Разработана методика прогнозирования процесса сокристаллизации. Представлены критерии образования, определяющие соотношения компонентов в сокристаллах на основе данных об их составе и характере межатомных взаимодействий.

Практическая значимость диссертационной работы заключается в следующем:

1. Предложенные программные комплексы могут быть использованы для предсказания структуры и расчетов физико-химических характеристик сокристаллов, и позволяют оценить перспективы их практического использования.

2. Полученные результаты дают теоретическую основу для направленного синтеза многокомпонентных молекулярных сокристаллов сложной структуры для практических приложений в области энергоёмких материалов.

Изучение автореферата позволяет сделать вывод о том, что полученные в диссертации результаты **достоверны**, а сформулированные выводы и основные положения обоснованы, поскольку они базируются на методах квантовой химии и хорошо зарекомендовавшей себя теории Атом-Атомных потенциалов. Полученные в результате моделирования структуры хорошо согласуются с экспериментальными данными монокристаллической рентгеновской дифракции. Проведённая автором оценка энтальпии сублимации и образования полиазотистых соединений находится в соответствии с термодинамическими, калориметрическими данными.

Содержание всех разделов диссертационной работы апробировано автором на Всероссийских и международных конференциях и достаточно полно отражено в научных публикациях.

По представленному автореферату диссертации можно сделать следующее замечание:

- Имеются неточности в формулировках. В первую очередь нужно было более четко поставить научную задачу исследований в соответствие с целями работы. На 5 странице автор об этом и рассуждает, но научная задача оказалась в разделе Цели работы.

Высказанное замечание не снижает общей важности проведённых исследований и носит рекомендательный характер.

Судя по автореферату, диссертационная работа Барабошкина Н.М. является законченным научным квалификационным трудом, удовлетворяющим требованиям

«Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г., а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Начальник сектора исследования
взрывчатых составов,
кандидат химических наук



Маланчева Людмила Васильевна

Ученый секретарь,
кандидат химических наук



Долганова Наталья Викторовна

08.11.2022