

## Отзыв

на автореферат диссертационной работы

**Барабошкина Никиты Михайловича**

«Теоретический дизайн в направленном синтезе энергоемких полиазотных сокристаллов»,

представленной на соискание ученой степени

кандидата химических наук по специальности 1.4.4 - физическая химия.

Полиазотные гетероциклические соединения широко используются в качестве высокоэнергоемких соединений, красителей, лекарственных препаратов, нелинейнооптических материалов и др. В настоящей работе представлены задачи и пути их решения в области энергоемких материалов (ЭМ). Получение индивидуальных энергоемких материалов, с повышенной мощностью, весьма сложный процесс, поскольку рост энергосодержания приводит к повышению чувствительности веществ к внешнему воздействию и снижению термостабильности. Кроме того, индивидуальные соединения должны обладать высокой плотностью молекулярных кристаллов, т.к. плотность, энтальпия образования и химический состав являются основными характеристиками оценки эффективности ЭМ при расчетах их физико-химических свойств. Моделирование строения полиазотных сокристаллов и дальнейшее выявление взаимосвязей между способностью соединений образовывать сокристаллы в тех или иных соотношениях в зависимости от структуры исходных соединений, является актуальной задачей. Современное развитие вычислительных ресурсов позволяет применять расчетные методы для моделирования строения и оценки физико-химических характеристик для достаточно сложных структур, в том числе, и полиазотных сокристаллов.

В данной работе разработана эффективная методика моделирования кристаллического строения и оценки энтальпий сублимации полиазотных соединений различных химических классов и сокристаллических форм, основанная на методе Атом-Атомных Потенциалов в комбинации с методами квантовой химии. Оптимизированы наборы потенциалов и рекомендованы оптимальные модели молекулярно-электростатического потенциала.

С использованием методики выполнено моделирование кристаллического строения и рассчитаны энтальпии сублимации широкого круга азолов. Проведено сравнение различных изомерных форм БТФ. Результаты моделирования сольвата ФТДО-бензол сопоставлены с данными РСА, что позволило выполнить прогнозирование кристаллического строения индивидуального ФТДО и оценить его физико-химические характеристики. Молекулярно-кристаллическая плотность ФТДО ( $1.85 \text{ г/см}^3$ ) значительно выше, чем плотность его сокристалла с бензолом ( $1.55 \text{ г/см}^3$ ). Смоделированы и подтверждено экспериментально структуры сокристаллов ФТДО-БТФ с различным соотношением компонентов. Показана термодинамическая предпочтительность образования сокристалла ФТДО-БТФ в соотношении (3:1).

Смоделированы сокристаллы БТФ с энергоемкими соединениями в различных соотношениях, а где это возможно полученные результаты подтверждены экспериментальными данными и дана оценка термодинамической эффективности и рекомендации для экспериментального получения ряда сокристаллов.

Автор работы Барабошкин Никита Михайлович осуществил поиск и анализ литературы по современному состоянию, месту и значению применяемых методов моделирования строения молекул и кристаллических структур, методов используемых для

расчетов пространственного и электронного строения молекул, а так же проанализировал сведения о достоинствах и недостатках методов, используемых для моделирования кристаллического строения. Проанализированы методические основы моделирования кристаллического строения моно- и сокристаллов.

Результаты, полученные в работе, представлены в виде докладов на российских и международных конференциях, опубликованы в рецензируемых научных журналах.

Автореферат работы грамотно изложен, хорошо иллюстрирован таблицами и графическими материалами, что облегчает восприятие текста.

Принципиальных замечаний к выполненному исследованию нет.

В целом изложенные в автореферате сведения указывают на то, что диссертационная работа Барабошкина Никиты Михайловича является законченным научным исследованием. Полученные соискателем результаты представляют интерес для специалистов, работающих в области получения и изучения физико-химических характеристик полиазотных соединений и их сокристаллов. Сформулированные в работе критерии образования сокристаллических форм позволяют до стадии синтеза оценить перспективность их дальнейшего получения и определить соотношение компонентов. Полученные результаты могут служить теоретической основой для направленного синтеза многокомпонентных сокристаллов сложной структуры.

Работа выполнена на высоком экспериментальном уровне, с использованием широкого спектра современных программных комплексов и квантово-химических методов.

Апробация работы отмечена участием в конференциях различного уровня. Основные положения работы, выносимой на защиту, в достаточном объеме изложены в публикациях автора.

Таким образом, Барабошкин Никита Михайлович проявил себя сложившимся научным работником и заслуживает присуждения степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Отзыв рассмотрен и обсужден  
на заседании кафедры химии  
ФГБОУ ВО «Марийский государственный  
университет» от 1 ноября 2022 года,  
протокол № 3.

Доцент кафедры химии  
ФГБОУ ВО «Марийский государственный  
университет», к.х.н

Петухова Татьяна  
Вениаминовна



Почтовый адрес: 424001, г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, 1  
Тел.: 8(8362)687900 доб. 1664  
E-mail: chemistry@marsu.ru

