

## ОТЗЫВ

научного консультанта о работе аспиранта  
Барабошкина Никиты Михайловича

Барабошкин Н.М. в ходе обучения в очной аспирантуре ИОХ РАН (под руководством д.х.н. Пивинной Т.С.) выполнил научную работу, посвященную теоретическому и расчетному конструированию молекулярно-кристаллического строения новых двухкомпонентных молекулярных соединений (сокристаллов) с высоким содержанием атомов азота в молекулах компонентов гетероциклического типа.

Данная работа весьма актуальна в фундаментальном плане, поскольку дает возможность проверить и оценить на конкретных примерах применимость существующих модельных методов расчета для предсказания кристаллических структур, образованных упаковкой молекул разного сорта.

В качестве основного инструмента решения поставленной задачи диссертант выбрал комплекс программ, реализующий технологию предсказания структур органических кристаллов (см. Дзябченко А.В. Ж. физ. химии, 2008, **82**, 1861). В их числе:

- программа RMS для поиска глобального минимума потенциальной энергии в пространстве структурных параметров молекулярного кристалла;

- программа CRYCOM для численного сравнения структур в терминах параметров элементарных ячеек и координат атомов либо параметров жесткого тела молекул;

- программа FitMEP для получения эффективных зарядов в молекуле на основе ее электростатического потенциала (МЭП).

В методическом отношении важным моментом в диссертации является то, что прежние теоретические модели из литературных источников (параметры атом-атомных потенциалов, схемы подбора эффективных зарядов, метод квантовой химии для расчета электронной структуры молекулы и оптимизации ее геометрии), критически оцениваются с точки зрения согласия экспериментальных структурных характеристик с предсказанными по результатам глобальной минимизации энергии. При наличии существенных расхождений в

геометрии структур автор идет дальше, стараясь минимизировать структурные отклонения за счет корректировки параметров потенциалов (то есть, решает *обратную задачу* моделирования). Протестированная (и улучшенная) на известных из эксперимента структурах модель расчета применяется далее для *ab initio* предсказания неизвестных или гипотетических структур, для которых отсутствует, вообще говоря, всякая экспериментальная кристаллическая информация.

В современных моделях межмолекулярного взаимодействия общепризнано использование эффективных зарядов атомов, полученных аппроксимацией МЭП из квантовохимического расчета молекулы. Существенным моментом диссертации является использование моделей «смещенных зарядов», которые, в отличие от обычных атомных зарядов, фиксированных на ядрах атомов, приближают МЭП с исключительно высокой точностью.

В диссертации показано, что данный подход позволяет успешно предсказывать основные характеристики структур (федоровская группа симметрии, параметры решетки и координаты всех атомов) рассматриваемых сокристаллов. Сопоставление энергии решетки сокристалла с суммой энергий решеток кристаллов индивидуально чистых компонентов (взятых с соответствующими весами) позволяет судить о термохимической выгодности образования сокристалла того или иного состава. Применение расчета для прогнозирования новых сокристаллов проведено в диссертации на показательном ряде примеров, включая и те, которые были реально синтезированы, а их структуры получили экспериментальное подтверждение.

В процессе своей деятельности Барабошкин Н.М. зарекомендовал себя как инициативный, ответственный и целеустремленный исследователь.

Результаты исследований Барабошкина Н.М. отражены в 8 публикациях в отечественных и зарубежных рецензируемых журналах, включенных в международные базы данных Web of Science и Scopus, а также представлены на одной международной и шести всероссийских научных конференциях по химии

Барабошкин Н.М. является вполне сформировавшимся молодым ученым, заслуживающим присуждения ему ученой степени кандидата химических наук.

К.х.н.



Дзябченко А.В.

Подпись к.х.н., Дзябченко А.В. заверяю  
Ученый секретарь ИОХ РАН к.х.н  
04.09.2022



И.К. Коршевец