

## Отзыв

научного руководителя о работе аспиранта  
Барабошкина Никиты Михайловича

Н.М. Барабошкин поступил в аспирантуру ИОХ РАН в лабораторию «Молекулярного моделирования и направленного синтеза» (№ 44) 15 сентября 2017 г. для выполнения научно-квалификационной работы на соискание ученой степени кандидата химических наук. За время работы приобрел необходимые фундаментальные знания в области квантовой химии, кристаллохимии, термохимии, РСА и физической химии. Им освоены многие расчетные методы и программные комплексы.

Диссертационная работа Н.М. Барабошкина посвящена разработке эффективного метода моделирования кристаллического строения H,C,N,O-содержащих соединений и оценке возможности их сокристаллизации для направленного синтеза полиазотных сокристаллов, что явилось расширением области применения методов квантовой химии и Атом-Атомных Потенциалов.

Исследование диссертанта отличается принципиальной новизной, поскольку впервые были предложены критерии оценки возможности сокристаллизации и разработана методика прогнозирования этого процесса с определением соотношения компонентов в сокристаллах на основе данных об их составе и характере межатомных взаимодействий. Разработанные методические приемы ориентированы на эффективный поиск строения и предсказание структуры полиазотных соединений и их сокристаллов и расчеты физико-химических характеристик, позволяющие оценить их перспективность для практического использования.


Осуществление компьютерного дизайна ряда индивидуальных структур и их сокристаллов было дополнено целенаправленным синтезом этих соединений, а результаты прогнозирования подтверждены методами РСА.

Следует отметить широту научных интересов соискателя, его настойчивость в решении поставленных задач, контактность, благожелательность, умение заинтересовать и привлечь к работе специалистов смежных областей.

Результаты исследований Н.М. Барабошкина отражены в 8 публикациях в рецензируемых отечественных и зарубежных журналах, включенных в международные базы данных Web of Science и Scopus, а также представлены на 6 международных и всероссийских конференциях по органической и физической химии, кристаллохимии и спец-химии энергоемких материалов. Он участвовал в работах по Проектам РФФИ и имел персональный аспирантский грант РФФИ, а также принимал активное участие в руководстве дипломной работы студентки РХТУ им. Д.И. Менделеева А.-М. Стратулат.

Н.М. Барабошкин является сформировавшимся молодым ученым, способным к решению научных проблем и заслуживающим присуждения ему ученой степени кандидата химических наук.

В.н.с. лаборатории № 44 ИОХ РАН,  
д.х.н., профессор

 /ПИВИНА Т.С./

Подпись д.х.н., проф. Пивиной Т.С. заверяю.

Ученый секретарь ИОХ РАН,  
к.х.н.

 /КОРШЕВЕЦ И.К./

25.08.2022

