

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Е.А.Капустина «Роль межмолекулярных взаимодействий в ряду N-метилированных производных глицина в формировании кристаллических структур и их отклике на изменение давления и температуры», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.21 - химия твердого тела

Установление закономерностей «состав – структура – свойство» для твердофазных соединений и материалов представляет большой интерес как с точки зрения исследований влияния условий получения, компонентного состава, разного рода обработок на процессы, происходящие в структуре, так и с точки зрения разработки принципов создания новых материалов с высоким комплексом физико-химических свойств. Особый интерес представляют молекулярные кристаллы органических соединений, на базе которых возможно создание новых полиморфных структур за счет направленной модификации сходящих в состав молекул и соединений. Применение разного рода внешних воздействий (термических, механических и др.) позволяет значительно изменять структуру материалов и, как следствие, их свойства. В связи с этим, исследование роли межмолекулярных водородных связей N–H \cdots O и диполь-дипольных взаимодействий в ряду N-метилированных производных глицина в образовании кристаллической структуры и ее искажении при повышении давления и понижении температуры представляется важным и актуальным.

В работе поставлены важные задачи исследования влияния давления и температуры на стабильность и изменение кристаллической структуры и причин, вызывающих эти изменения. В процессе исследования получен ряд важных результатов:

- определены структурные модификации N-метилглицина, N,N-диметилглицина, N,N,N-триметилглицина в температурном интервале 100 - 295 К;
- получены данные, свидетельствующие о фазовых переходах в ромбическом полиморфе N,N-диметилглицина вблизи 200 К (1), в N-метилглицине и N,N,N-триметилглицине при быстром повышении и понижении давления (2), что указывает на важность рассмотрения в исследуемых объектах эволюции структуры при изменении и давления, и температуры;
- определены области стабильности двух полиморфных модификаций N,N-диметилглицина, полученные экспериментальные данные хорошо согласуются с квантово-химическими расчетами;

Еще один любопытный результат – при повышении давления структура саркозина сжимается с резким изменением сжимаемости. Немонотонные изменения сжимаемости структуры вдоль оси *a* автор объясняет изначальным схлопыванием внутренних пустот при низких давлениях, за которым следует структурное сжатие преимущественно вдоль бесконечных цепочек после 2.1 ГПа. Полученные автором результаты позволили также сделать заключение о возникновении самолокализованного состояния колебаний N–H \cdots O в N-метилглицине при охлаждении.

К числу наиболее интересных результатов диссертанта следует отнести заключение о характере сжатия кристаллических структур N-метилглицина, ромбической и моноклинной полиморфных модификаций N,N-диметилглицина, N,N,N-триметилглицина при понижении температуры до 100 К, а также заключение о

