

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации

КАПУСТИНА Евгения Алексеевича

**«РОЛЬ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ
В РЯДУ N-МЕТИЛЛИРОВАННЫХ 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.

Диссертационная работа Капустина Е.А. актуальна как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения. Молекулярные кристаллы биоорганических соединений (например, аминокислоты) рассматриваются в настоящее время как перспективные материалы для разработки новых биосовместимых сенсоров, покрытий, пьезоэлектрических элементов для медицинского оборудования и т.п. В первую очередь это связано с тем, что пьезоэлектрические, диэлектрические и нелинейно-оптические коэффициенты некоторых органических кристаллов не уступают, а порой и превышают таковые лучших неорганических материалов. Не менее важна и возможность управления составом и конформацией органических молекул, возможность создания кристаллов различных полиморфных модификаций. Все это благодаря уникальному сочетанию различных типов взаимодействий, присущему органическим соединениям. В связи с этим, изучение роли тех или иных межмолекулярных связей в образовании кристаллической структуры, а также установление связи между характером таких взаимодействий и макроскопическими свойствами материала является актуальной научной задачей.

Автором выполнен большой объем экспериментальных работ по получению монокристаллов различных метилпроизводных глицина и аттестации их кристаллической структуры в широком диапазоне температур и давлений с помощью рентгеноструктурного анализа. Системный подход и проведенный сравнительный анализ кристаллических структур исследуемых кристаллов выявил

формирование в кристаллах N,N-диметилглицина топологически различных структурообразующих мотивов с помощью одной единственной водородной связи – замкнутые четырехчленные кольца и бесконечные цепочки. Детальные исследования закономерностей фазовых превращений исследуемых кристаллов при изменении температуры и гидростатического давления позволили автору предложить механизм наблюдающихся переходов, а также влияние на них скорости повышения и обратного понижения давления. Полученные Капустиным Е.А. результаты важны для понимания факторов, определяющих структуру молекулярных органических кристаллов, и могут использоваться как для совершенствования методов выращивания таких кристаллов, так и при квантово-химическом моделировании кристаллов, молекулярных и супрамолекулярных структур и биополимеров.

Автореферат написан связно и понятно. Он в достаточной мере информативен, и дает полное представление о выполненных исследованиях. По содержанию можно сделать следующие замечания:

1. Пятый вывод диссертационной работы относится к возможности возникновения самолокализованного состояния колебаний N–H…O в исследуемых кристаллах. Однако в тексте автореферата этот вопрос освещен очень поверхностно, его обсуждение практически отсутствует. Это вызывает сомнения о его значимости для данной работы.
2. В автореферате указано, что при быстром повышении давления в интервале давлений от 1.4 до 2.9 ГПа в спектрах комбинационного рассеяния бетаина наблюдаются «интересные особенности». Однако как следует из рисунка 8, в этом интервале наблюдается всего лишь линейное увеличение частоты валентных колебаний C–H. Особенности возникают при давлении большем 2.9 ГПа.

Сделанные замечания не снижают общей высокой оценки представленной работы; решенные в ней задачи, имеют существенное значение для химии твердого тела и ряда практических применений. Результаты исследований прошли достойную апробацию. Они опубликованы в журналах, рекомендованных ВАК РФ, и доложены на всероссийских и международных конференциях.

По своей актуальности, научной значимости и объему выполненных исследований диссертационная работа, несомненно, удовлетворяет требованиям, ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Капустин Евгений Алексеевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.21 – химия твердого тела.

Главный научный сотрудник Института Естественных Наук
Уральского федерального университета,
директор Уральского центра коллективного пользования
«Современные нанотехнологии» УрФУ,
зав. лабораторией сегнетоэлектриков
НИИ физики и прикладной математики ИЕН УрФУ,
доктор физ.-мат. наук, профессор

Шур Владимир Яковлевич
620000, г. Екатеринбург, ул. Ленина 51
Телефон: (343) 261-74-36
E-mail: vladimir.shur@urfu.ru



В.Я. Шур

Старший научный сотрудник лаборатории наноразмерных
сегнетоэлектрических материалов Института Естественных Наук
Уральского федерального университета,
доцент кафедры компьютерной физики ИЕН УрФУ
кандидат физ.-мат. наук

Зеленовский Павел Сергеевич
620000, г. Екатеринбург, ул. Ленина 51
Телефон: (343) 261-74-36
E-mail: zelenovskiy@urfu.ru

П.С. Зеленовский