

Отзыв

на автореферат диссертации Капустина Евгения Алексеевича «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».

Работа Капустина Е.А. посвящена исследованию влияния низкой температуры и высокого давления на кристаллическую структуру и параметры межмолекулярной водородной связи и диполь-дипольных взаимодействий в кристаллах N-метилглицина (саркозина), ромбической (ДМГ-1) и моноклинной (ДМГ-2) полиморфных модификаций N,N-диметилглицина и N,N,N-триметилглицина (бетаина) методами монокристалльного рентгеноструктурного анализа и спектроскопии комбинационного рассеяния (КР).

Кристаллы, содержащие аминокислоты, нередко обладают важными физическими свойствами и являются перспективными с точки зрения их применения в качестве нелинейно-оптических или пьезоэлектрических материалов. Помимо этого, системы, содержащие аминокислоты, являются биоимитационными, поэтому задача выяснения поведения отдельных водородных связей и кристаллических структур в целом при варьировании внешних воздействий, таких, как температура и давление, очень важна для химии твердого тела, и ее актуальность не вызывает сомнений. Использование поляризационной КР-спектроскопии позволило соискателю выявить спектральные характеристики отдельных водородных связей в структуре исследованных кристаллов, что является несомненным достоинством представленной работы. Для выполнения задач, поставленных в рамках диссертационной работы, Е.А. Капустин профессионально освоил методики КР-спектроскопии и монокристалльного рентгеноструктурного анализа. Работа выполнена на высоком методическом и экспериментальном уровне.

Есть, однако, претензии к представлению в автореферате полученных результатов. Есть также замечания, касающиеся его оформления.

К сожалению, автореферат не содержит ни одного численного параметра, позволяющего оценить структурные изменения при варьировании внешних условий; все сравнения представлены на качественно уровне. Несомненно, все это присутствует в диссертации, но, на мой взгляд, какой-то минимум необходим и в автореферате.

Вынужден отметить традиционную ошибку многих соискателей в формулировке цели работы (стр. 3): исследование, пусть и сравнительное, не может быть целью, это средство достижения цели.

В главе 4 на стр. 9–10 отмечено возникновение т.н. «самолокализованного состояния» в саркозине при охлаждении, один из выводов работы также основан на этом явлении. В то же время, не дано объяснение, в чем именно оно проявляется, не приведены также какие-либо численные характеристики либо графические зависимости, демонстрирующие эффект.

Там же, на стр. 10–11, описание двойникования ромбического (пр. группа *Pbca*) N,N-диметилглицина при низкотемпературном фазовом переходе в моноклинную модификацию дано некорректно. Так, пространственная группа низкотемпературной фазы

$P2_1/b$, или в полной записи $P2_1/b11$, имеет особое направление не вдоль b -оси, как утверждает соискатель, а вдоль a -оси. Заодно отмечу, что ось b^* обратной решетки не является кристаллографической осью. Далее, двойниковые блоки при таком понижении симметрии должны быть расположены зеркально симметрично, а не связаны поворотом, как сказано в автореферате. Эти непонятности могли бы быть сняты, если бы был приведен закон двойникового, чего, к сожалению, нет ни в автореферате, ни в диссертации. Оси обратной решетки на рис. 2 (стр. 10) для моноклинной фазы также даны с ошибкой. Известно, что моноклинный угол β^* обратной решетки имеет значение меньше 90° (при $\beta > 90^\circ$). На рисунке же он явно больше 90° .

В главе 5 на стр. 17–18 автореферата утверждение о значительном различии в поведении саркозина и бетаина при охлаждении и при повышении давления недостаточно подкреплено экспериментальными данными: зависимости по давлению содержат три (саркозин) и две (бетаин) экспериментальные точки (рис. 9).

Первый вывод (стр. 20) сформулирован неудачно: второе предложение противоречит первому, ибо и в отсутствие водородных связей в бетаине его структура все же образуется.

Отмеченные недостатки несколько портят впечатление от работы, но не снижают ценности полученной научной информации. Судя по представленному автореферату, в работе получен большой объем новых практически важных результатов. По теме диссертации автором опубликовано 16 работ, том числе пять статей из списка ВАК, что существенно превышает требования ВАК к кандидатским диссертациям. Автореферат также отвечает этим требованиям, а автор диссертации, Евгений Александрович Капустин, без сомнения заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.21 – химия твердого тела.

16.10.2015 г.

ведущий научный сотрудник, доктор химических наук
Серёткин Юрий Владимирович,

630090, г. Новосибирск, пр-т Академика Коптюга, 3
тел. (383) 333-24-06, yuvsv@igm.nsc.ru

630090, г. Новосибирск, пр-т Академика Коптюга, 3
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева
Сибирского отделения Российской академии наук
тел. (383) 333 26 00, chief@igm.nsc.ru, <http://www.igm.nsc.ru>

Подпись заверяю:
Ученый секретарь ИГМСО РАН,
к.г.-м.н.



Н.С. Тычков