

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Рычкова Дениса Александровича «Изучение взаимосвязи конформационных изменений в молекуле и формирования кристаллической структуры в ходе кристаллизации или полиморфных превращений (на примере полиморфных модификаций метацетамола, толазамида, L-серина и солей серотонина)», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.21 – «Химия твёрдого тела»

Исследование явления полиморфизма и изучение закономерностей фазовых переходов в молекулярных кристаллах биологически значимых веществ позволяет продвигаться в управлении их свойствами и в разработке стратегий синтеза новых материалов. Поэтому диссертационная работа Рычкова Д.А., посвященная изучению структуры и полиморфных превращений биологически активных соединений метацетамола, толазамида, L-серина и солей серотонина, безусловно, имеет *практическую значимость*. В центре внимания работы – изучение фазовых переходов в указанных соединениях и связанный с ними аспект конформационной подвижности рассматриваемых молекулярных структур. Автор приходит к выводу о том, что конформационные особенности молекул нельзя игнорировать при прогнозировании структуры новых полиморфных фаз. В работе показано, что конформационная подвижность может стать ключевым фактором при объяснении причин фазовых переходов. Проведенные исследования *актуальны*, так как позволяют извлекать информацию о причинах фазовых переходов, как при нормальных, так и при экстремальных условиях.

Работа носит экспериментально-теоретический характер. Диссертантом реализованы новые способы кристаллизации; применены дифракционные, спектроскопические методы и термический анализ для установления фактов изменений в кристаллических структурах; использованы теоретические методы моделирования и оценки энергетических характеристик рассматриваемых кристаллических решеток, молекулярных структур и фрагментов кристаллов. Применены полуэмпирические методы на основе атом-атомных потенциалов и неэмпирические методы квантово-химических расчетов достаточно высокого уровня. Все это позволило усилить *достоверность получаемых результатов* и данных о свойствах изучаемых кристаллических соединений.

Автореферат дает полное представление о выполненной автором исследовательской работе. Тем не менее, имеются отдельные *вопросы*, уточняющего характера.

1. В работе упоминается, что при проведении энергетических оценок межмолекулярных взаимодействий привлекалось приближение изолированных пар

молекул. Как правило, пары молекул в ходе локализации геометрии, отвечающей глобальному минимуму энергии, «разваливаются». Какой смысл имеет сравнение пар конформационных полиморфов в таком подходе, если они могут значительно меньше отличаться друг от друга, чем каждый из них от результата оптимизации в газовой фазе?

2. Таблица 2 иллюстрирует противоречивые расчетные данные: два полуэмпирических метода (AA-CLP и PIXEL) выстраивают энергии кристаллических решеток трех полиморфов толазамида прямо в противоположном порядке. Какому же методу автор отдает предпочтение? Или с позиций данных методов полиморфы энергетически неразличимы в пределах погрешности расчетов?

Возникшие уточняющие вопросы и замечания не умаляют ценности и значимости полученных результатов.

Можно заключить, что диссертация Д.А. Рычкова «Изучение взаимосвязи конформационных изменений в молекуле и формирования кристаллической структуры в ходе кристаллизации или полиморфных превращений (на примере полиморфных модификаций метацетамола, толазамида, L-серина и солей серотонина)» представляет собой завершенную научно-квалификационную работу и соответствует всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, установленным в Положении о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ, а её автор, Рычков Денис Александрович, несомненно, заслуживает присуждения степени учёной степени кандидата химических наук по специальности 02.00.21 – «Химия твёрдого тела».

25.11.2015 г.

Доцент, к.х.н., доцент кафедры органической химии
Химического факультета
ФГБОУ ВПО "ЮУрГУ"(НИУ)

 Барташевич Екатерина Владимировна

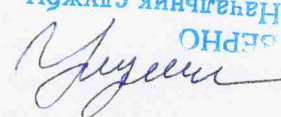
Д.х.н., декан Химического факультета
ФГБОУ ВПО "ЮУрГУ"(НИУ)

 Авдин Вячеслав Викторович

454080, г. Челябинск, просп. В.И. Ленина, д. 76.
ФГБОУ ВПО «Южно-Уральский государственный университет»
(национальный исследовательский университет) г. Челябинск
bartashevichev@susu.ac.ru
+7(351)2679517

Подписи Авдина В.В. и Барташевич Е.В. заверяю




Национальный исследовательский университет
Южно-Уральский государственный университет
Челябинск