

Отзыв об автореферате 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)»,

Представление на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.21  
«Химия твердого тела»

Диссертация Д.А.Рычкова посвящена изучению взаимосвязи конформации отдельной молекулы и структуры кристаллов, образующихся в ходе различных фазовых превращений. В качестве модельных объектов исследований выбраны полиморфные модификации метацетамола, толазамида, L-серина и солей серотонина. Спектр исследованных веществ выбран исходя из сочетания полиморфных свойств и их практической востребованности, что обуславливает актуальность и практическую значимость данной работы.

К наиболее значимым результатам можно отнести сравнение данных по кристаллической структуре исследованных веществ и экспериментально определенным областям стабильности с результатами квантово-химических расчетов. В частности, был исследован вклад объемной составляющей и межмолекулярных взаимодействий в энтальпию различных кристаллических модификаций L-серина. Таким образом было детально изучено поведение полиморфных модификаций в области высоких давлений. Для толазамида были показаны основные межмолекулярные взаимодействия, стабилизирующие две принципиально различные внутренние структуры кристаллов. Для серотонина было обнаружено, что его конформация в кристаллах солей зависит от конформации в маточном растворе. Устойчивая конформация в растворе была определена также с помощью квантово-механических расчетов.

Хотя в целом автореферате написан простым, доступным языком, иногда встречается жаргон и недостаточность информации на рисунках. Например, на стр. 5 утверждается что, "энергия решетки ... проигрывается". Подписи к рис. 1 и 2 не указывают тип соединения, для которого приведены данные. Из текста автореферата следует, что, видимо, речь идет о метацетамоле.

Сделанные замечания не умаляют ценности исследования, которое демонстрирует способность соискателя выполнять работу на высоком научном уровне, с использованием передовых экспериментальных и расчетных методов.

Работа Рычкова Д.А. по актуальности темы, количеству и качеству (новизна, достоверность, оригинальность) полученных результатов и другим параметрам полностью соответствует требованиям ВАК. Диссертант Рычков Д.А. заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности «химия твердого тела».

С.н.с., руководитель группы ИК СО РАН,  
к.х.н

А. Г. Окунев

Подпись А. Г. Окунева удостоверяю:  
Ученый секретарь ИК СО РАН, д.х.н.

Д. В. Козлов

Алексей Григорьевич Окунев,  
К.х.н., С.н.с., руководитель группы ИК СО РАН

ФГБУН Институт катализа им. Г.К.Борескова СО РАН  
630090, г.Новосибирск, пр-т. Академика Лаврентьева, 5  
Тел. (383)330-67-71  
Факс: (383)330-80-56  
Эл.почта bic@catalysis.ru  
<http://www.catalysis.ru>