

## 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 метациетамола,  
толазамида, L-серина и солей серотонина)»  
на соискание ученой степени кандидата химических наук  
по специальности 02.00.21 – Химия твёрдого тела

Диссертационная работа Рычкова Дениса Александровича посвящена актуальной фундаментальной проблеме изучения механизмов фазовых переходов в молекулярных кристаллах с учетом конформационных особенностей молекул при анализе и прогнозировании кристаллических структур. Последнее обуславливает практическую значимость исследования, т.к. большая часть биологически активных органических веществ, используемых в качестве фармацевтических субстанций, находится в кристаллическом состоянии, а биохимические реакции, в которых участвуют эти вещества, являются стереоспецифичными.

Работа Рычкова Д.А. относится к той редко встречающейся категории комплексных исследований, в которых экспериментальные прямые структурные и спектроскопические методы удачно сочетаются с современными квантово-химическими расчетами. Поэтому становится возможным не только надежно фиксировать конформационные и надмолекулярные превращения, но и разбираться в их физических причинах, детально проследивать этапы и механизмы реакций.

Автореферат отражает основные результаты этой очень интересной работы. Вместе с тем, в тексте автореферата, на мой взгляд, недостаточно отражены детали методик исследования, например, не приводится обоснование применения конкретных полуэмпирических методов и обменно-корреляционных функционалов при DFT расчетах в привязке к объектам исследования.

Исследования выполнены на очень хорошем научном уровне. Основные результаты работы опубликованы в рейтинговых журналах и апробированы на отечественных и зарубежных конференциях. Из автореферата диссертации Д.А. Рычкова следует, что работа соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор Рычков Денис Александрович заслуживает присвоения ему учёной степени кандидата химических наук по специальности 02.00.21 – химия твердого тела.

Старший научный сотрудник  
лаборатории механоактивации  
органических систем отдела  
физики и химии наноматериалов  
ФТИ УрО РАН, кандидат  
физико-математических наук

Рыбин Дмитрий Станиславович

426000, РФ, г. Ижевск, ул. Кирова, 132, ФГБУН ФТИ УрО РАН, тел.8(3412)723261, e-mail:  
dsrybin@ftiudm.ru

«Подпись Д.С. Рыбина удостоверяю»

Ученый секретарь ФТИ УрО РАН,

к.х.н.



О.Ю. Гончаров