

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 учёной степени кандидата
химических наук по специальности 02.00.21 – Химия твердого тела

Отыскание закономерностей «состав – структура – свойство» для твердофазных соединений и материалов, изучение влияния условий синтеза, химического и фазового состава, а также температуры, давления, внешних воздействий на свойства твердофазных соединений и материалов, является важной задачей химии твердого тела. В этой связи работа Капустина Е.А., посвященная изучению роли межмолекулярных водородных связей $N-H \cdots O$ и диполь-дипольных взаимодействий в ряду N-метилированных производных глицина в образовании кристаллической структуры и ее искажении при повышении давления и понижении температуры, весьма актуальна.

Капустиным Е.А. проделан большой объем работы. Им получены монокристаллические образцы N-метилглицина, N,N-диметилглицина, N,N,N-триметилглицина и проведен сравнительный анализ их структур, исследовано влияния температуры и давления на их кристаллические структуры, а также проведен анализ отклика структурообразующих межмолекулярных водородных связей $N-H \cdots O$ по отношению к варьированию температуры и гидростатического давления. Проведен сравнительный анализ двух полиморфных модификаций N,N-диметилглицина дифракционными и спектроскопическими методами в сопоставлении с результатами квантово-химических расчетов.

В диссертации получен ряд важных результатов. Капустин Е.А. впервые получил кристаллическую структуру моноклинной полиморфной модификации N,N-диметилглицина и детально проанализировал все структуры N-метилпроизводных при нормальных условиях, а также структурные изменения при понижении температуры вплоть до 100 К. Найдено, что с помощью единственной водородной связи в структуре N,N-диметилглицина могут формироваться совершенно разные структурообразующие мотивы – замкнутые четырехчленные кольцевые мотивы и изолированные бесконечные цепочки «голова к хвосту». Обнаружены и изучены фазовые переходы в N-метилглицине и N,N,N-триметилглицине при повышении гидростатического давления, проанализирована их зависимость от скорости повышения и понижения давления.

Работу отличает высокий современный уровень исследований и публикаций.

Работа Капустина Евгения Алексеевича представляет завершённое научное исследование и имеет практическую полезность решения актуальной задачи. Основные положения диссертации освещены в опубликованных работах.

Диссертация Капустина Евгения Алексеевича отвечает всем требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 02.00.21 – Химия твердого тела.

Профессор кафедры информатики ГВУЗ
«Приазовский государственный
технический университет»
доктор физ.-мат. наук, профессор

В.П. Гранкин

Подпись профессора кафедры информатики
ГВУЗ «ПГТУ» д.ф.-м.н. проф. Гранкина В.П.
удостоверяю, начальник
общего отдела ГВУЗ «ПГТУ»



07.10.2015

Т.А. Захаренко