

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Гурьевой Светланы Анатольевны на тему «ИК-Фурье спектроскопия метастабильных состояний при фазовых переходах в длинноцепочечных молекулярных кристаллах», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 «Физика конденсированного состояния».

Диссертационная работа Гурьевой С.А. посвящена исследованию структурного полиморфизма и кинетики фазовых превращений в длинноцепочечных молекулярных кристаллах на примере ближайших гомологов n-алканов – трикозана n-C₂₃H₄₈ (С23) и тетракозана n-C₂₄H₅₀ (С24). Данная тематика относится к актуальным задачам физики конденсированного состояния и физики полимеров, требующим фундаментальных исследований механизмов структурных переходов в кристаллах высокомолекулярных соединений, которые характеризуются развитой иерархической организацией и наличием нескольких типов упорядочения.

Использование монодисперсных n-алканов в качестве модельных объектов представляется обоснованным, поскольку такие системы позволяют корректно исследовать роль эффекта чётности в различиях механизмов фазовых переходов в нечётном и чётном гомологах при существенно меньшем уровне структурной неоднородности, чем у кристаллических полимеров. Результаты подобных исследований представляют также заметный прикладной интерес в связи с использованием n-парафинов в качестве термоаккумулирующих материалов с фазовыми переходами (PCM).

Основу работы составляет исследования температурных вариаций ИК-Фурье спектров n-алканов на примере длинноцепочечных гомологов С23 и С24. Автором диссертации выполнен детальный анализ характера изменений полос поглощения, связанных с различными типами молекулярных колебаний, включая валентные и деформационные колебания метиленовых и метильных групп, а также колебательные прогрессии, характерные для длинных транс-последовательностей. К числу наиболее значимых результатов работы следует отнести установление последовательности фазовых состояний изученных гомологов n-алканов при нагревании и выявление особенностей кинетики переходов между кристаллическими и ротационными фазами. Особый интерес представляет обнаружение различий в характере развития полиморфных превращений для нечётного С23 и чётного С24 гомологов, связанных с различием исходной симметрии их кристаллических структур.

Следует отметить проведённый Гурьевой С.А. анализ колебаний метиленовых и метильных групп, локализованных в кристаллических сердцевинах ламелей и в межламеллярных областях. На основании этих данных предложена физическая интерпретация зарождения структурных перестроений в различных областях ламеллярной структуры для рассмотренных n-алканов разной чётности. Представленные результаты расширяют существующие представления о механизмах полиморфных превращений в длинноцепочечных молекулярных кристаллах.

Отдельного внимания заслуживает выполненное исследование конформационных дефектов различного типа и их роли в развитии ротационных фаз. Показано, что образование концевых гош- и кинк-дефектов коррелирует с переходами между различными структурными состояниями. Такой подход позволяет связать изменения спектральных характеристик с конкретными молекулярными механизмами структурных преобразований.

Полученные результаты опубликованы в 12 статьях рецензируемых научных изданий, а также прошли апробацию на российских и международных конференциях. Это свидетельствует о высокой степени достоверности и научной обоснованности полученных результатов и выводов.

