

ОТЗЫВ

научного руководителя на диссертационную работу Романова Владимира Владимировича **«Моделирование атомной структуры N-оксидов и поиск устойчивых полиморфов на основе квантовомеханических расчетов»**, представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния

Предлагаемая к защите диссертационная работа Романова Владимира Владимировича выполнена в русле работ по исследованию атомной структуры поликристаллических и некристаллических материалов, которые ведутся на кафедре физики твердого тела физико-технического факультета ФГБОУ ВО Петрозаводский государственный университет (ПетрГУ) достаточно длительное время. Переход на наноразмерный уровень исследуемых объектов требует освоения методов квантовомеханических расчетов состояния изучаемых систем.

Выбор объектов в данной работе был обусловлен экспериментальными рентгенографическими исследованиями, проводимыми на КФТТ в интересах кафедры органической химии ПетрГУ.

Наиболее важными представляются следующие результаты, полученные диссертантом:

1. Разработанная методика проведения численных расчетов по конформационному анализу может быть применена не только к N-оксидам, но и к другим молекулярным комплексам и областям ближнего упорядочения, содержащим до нескольких десятков атомов любых сортов.
2. Обнаружены ранее неизвестные конформеры 4-нитрохинолин-N-оксида и бис(4-хлорхинолин-N-оксид)водорода.

3. Доказана невозможность перегибридизации атома кислорода N-оксидной группы при изменении длины связи NO и при повороте фрагмента молекулы вокруг связи NO в молекулах гетероароматических N-оксидов и их комплексных соединений соответственно.

4. На основе квантовомеханических расчетов подтверждено, что структура аддукта Zn-тетрафенилпорфина с диоксаном, определенная методами рентгеноструктурного анализа является энергетически более выгодной, чем структура, в которой порфин относительно обоих лигандов находится в экваториальном положении.

Подобные результаты получены впервые.

Отмеченные здесь результаты свидетельствуют о том, что настоящая работа освещает некоторые новые аспекты изучаемой проблемы и в связи с этим является важным звеном в проводимых нами исследованиях.

Диссидентом самостоятельно разработаны подходы к оптимизации атомной структуры молекул и кластеров атомов и, в частности, поиску полиморфов молекул на основе теории функционала электронной плотности.

Им лично спланированы и выполнены исследования пространственной конфигурации изучаемых объектов, а также проведен анализ результатов компьютерных расчетов.

Романова Владимира Владимировича можно считать законченным специалистом в области подобных исследований.

Диссертационная работа Романова Владимира Владимировича является завершенным научным исследованием по одной из актуальных проблем современной физики конденсированного состояния. Публикации и автореферат полностью отражают основные положения и результаты диссертации. Диссертация удовлетворяет всем требованиям

ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Романов Владимир Владимирович, несомненно, заслуживает присвоения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния.

Доктор физико-математических наук

профессор КФТТ ПетрГУ

Фофанов А.Д.Фофанов

