

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Романова Владимира Владимировича «Моделирование атомной структуры N-оксидов и поиск устойчивых полиморфов на основе квантовомеханических расчетов», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

В диссертации поставлена и решена актуальная задача развития методов компьютерного моделирования и конформационного анализа применительно к исследованиям молекулярных комплексов.

Автором подробно изучен ряд методов квантовомеханических расчетов, предложенных ранее другими авторами, и проанализирована зависимость энергии молекулы от значений конформационных параметров.

На основании этого анализа он разработал утилиту для выполнения варьирования конформационных параметров заданной системы атомов в рамках программного пакета AVINIT.

Для подтверждения теоретических положений проведены экспериментальные исследования, целью которых был расчетный поиск новых конформеров 4-нитрохинолин-N-оксида и катиона бис(4-хлорхинолин-N-оксид)водорода, а также поиск энергетически выгодной структуры аддукта Zn-тетрафенилпорфирина с диоксаном.

Автором было показано, что устойчивые конформации молекулы в свободном состоянии и в кристалле различны

Достоверность экспериментальных данных была обеспечена использованием современных средств и методов проведения исследований. Автор достаточно корректно использует известные научные методы обоснования полученных результатов и выводов.

Автореферат содержит достаточное количество исходных данных, имеет необходимые пояснения, рисунки, графики. Написан квалифицированно и аккуратно оформлен.

Исходя из представленных в автореферате сведений, диссертация написана на высоком научном уровне, соответствует требованиям ВАК Минобрнауки России, и соискатель Романов Владимир Владимирович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Ивашевская Светлана Николаевна
кандидат физико-математических наук
научный сотрудник
Федерального государственного
бюджетного учреждения науки
Института геологии Карельского
научного центра Российской академии наук
185910, г. Петрозаводск, ул. Пушкинская 11
Тел. (8142) 78 27 53
e-mail: ivashevskaja@yahoo.com

/С.Н.Ивашевская/

01.06.2016

Дано согласие на обработку моих персональных данных

СТАРШИЙ ДОКУМЕНТОВЕД

Н. С. ПРОТАСОВА

« 01 » 06

20 16 г.

