ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Кривощапова Николая Владиславовича «Конформационная подвижность и стереоэлектронные эффекты в полициклических молекулах», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия (физико-математические науки)

Диссертационная работа Кривощапова Н. В. посвящена теоретическому моделированию полициклических молекул. В работе проведено моделирование четырех реакций сборки каркасных пероксидов из поликетонов, а также предложен новый подход к построению конформаций циклических молекул путём варьирования торсионных углов на основе обратной кинематики. Актуальность решаемых задач представляется обоснованной: полициклические пероксиды обладают ценной биологической активностью, а наивный способ изменения торсионных углов к циклическим системам неприменим.

Научная новизна работы состоит в том, что впервые была установлена роль стереоэлектронных эффектов в реакциях сборки каркасных пероксидов из ди- и трикетонов. Кроме того, предложен и реализован новый алгоритм конформационного поиска полициклических молекул на основе обратной кинематики. Результаты работы опубликованы в 8 статьях в ведущих научных журналах.

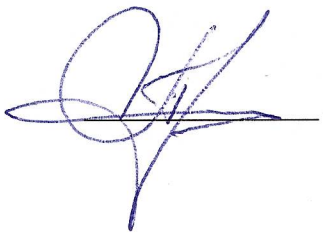
Научная новизна работы заключается в установлении роли стереоэлектронных эффектов в контроле реакций сборки каркасных органических пероксидов, а также в разработке нового подхода к конформационному поиску полициклических молекул. **Достоверность результатов** проведенных исследований обусловлена использованием современных методов теории функционала плотности для квантово-химического моделирования сборки каркасных пероксидов, а также сравнением разработанного алгоритма конформационного поиска с передовыми существующими методами. **Выводы** соответствуют поставленной в работе цели и задачам и отражают результаты проведённых исследований.

Замечания по работе отсутствуют.

Диссертационная работа «Конформационная подвижность и стереоэлектронные эффекты в полициклических молекулах» представляет собой завершенную научно-квалификационную работу, которая соответствует специальности 1.4.4 – Физическая химия (физико-математические науки) и по объему выполненных исследований, актуальности и новизне результатов отвечает всем требованиям, предъявляемым к диссертационным работам, установленных пунктом 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а автор, Кривощапов Николай Владиславович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Александр Александрович Павлов,
доктор химических наук (1.4.4 – Физическая химия), ведущий научный сотрудник центра цифрового материаловедения Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук (ИОНХ РАН)

16.09.2026 г.



А.А. Павлов

Почтовый адрес: 119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31.

Телефон: 89160758939

Электронная почта: alex90pavlov@mail.ru

