

## ОТЗЫВ

**доктора химических наук, профессора Ищенко Анатолия Александровича на автореферат диссертации Ковтуна Дмитрия Михайловича «Внутримолекулярная динамика и равновесная структура многоатомных молекул на основе адиабатической теории возмущений и методов решения некорректных обратных задач» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия**

Цель диссертационной работы Ковтуна Д.М. заключалась в развитии методики определения параметров внутримолекулярной динамики и равновесной структуры молекул при использовании традиционной газовой электронографии, дополненной результатами квантово-химических расчётов.

Реализация этой цели достигнута в результате выполнения расчётов, основанных на адиабатической теории возмущений и методах решения некорректных обратных задач; развитии и апробации вышеуказанной методики для решения проблем конформационного анализа многоатомных молекул, определения их поверхностей потенциальной энергии в адиабатическом приближении.

В качестве примера исследованы молекулы: 1,2-тиаарсол, уротропин, 2-метил-2-нитропропан, 3-нитростирол и пентафторид мышьяка.

**Актуальность** предложенного подхода состоит в развитии возможностей традиционного метода газовой электронографии для решения проблемы конформационного анализа многоатомных молекул с основным синглетным электронным состоянием, и, соответственно, не имеющих вырожденное или псевдовырожденное основное электронное состояние. Такие объекты исследования позволяют использовать понятие поверхности потенциальной энергии внутримолекулярных движений, и, следовательно, адекватное применение приближения адиабатической теории возмущений, указанное в названии диссертационной работы.

**Научная новизна работы.** Впервые при исследовании методом традиционной газовой электронографии были применены динамические модели при изучении структуры и внутримолекулярной динамики: 1,2-тиаарсола, уротропина, 2-метил-2-нитропропана, 3-нитростирола и пентафторида мышьяка.

Показана необходимость учета геометрических релаксаций при вычислении амплитуд колебаний в стереохимически нежёстких молекулах на примере нитроэтана.

Впервые молекула 3-нитростирола исследована методом газовой электронографии.

Применение предложенной методики, основанной на адиабатической теории возмущений и методах решения некорректных обратных задач, впервые позволило

получить равновесные структуры молекул 1,2-тиаарсола, уротропина, 2-метил-2-нитропропана, 3-нитростирола.

**Теоретическая и практическая значимость.** Полученные в диссертации молекулярные параметры опубликованы в Международном справочнике «Vogt N., Vogt J. Structure Data of Free Polyatomic Molecules. Springer – 2019», а также в Международной базе данных MOGADOC.

Полученная в диссертационной работе новая информация о структуре и динамике молекул может быть использована для расчёта термодинамических функций исследованных соединений; для коррекции параметризации полуэмпирических методов, методов теории функционала плотности и комбинированных методов квантово-химических расчётов и молекулярной механики.

Совокупность полученной в диссертационной работе Д.М. Ковтуна информации может использоваться в теории строения и динамики многоатомных молекул, служить справочным материалом для монографий и учебных курсов по строению молекул, физической химии и химической физике.

#### **Замечания.**

1. Название диссертации Д.М. Ковтуна: Внутримолекулярная динамика и равновесная структура многоатомных молекул на основе адиабатической теории возмущений и *методов решения некорректных обратных задач*.

Однако, методы решения некорректных (по Адамару) обратных задач в применении к исследуемым объектам в работе описаны недостаточно полно для понимания достигнутых результатов. Следует отметить, что одна из особенностей минимизации используемого в работе функционала Тихонова, влияющая на определяемые молекулярные параметры, состоит в *выборе параметра регуляризации*. Критерии выбора и влияния этого параметра в автореферате (и в диссертации) не представлены с необходимой степенью обоснованности.

2. В списке цитируемой в автореферате используемой литературы отсутствует ссылка на монографию А.А. Ищенко, Г.В. Гиричев, Ю.И. Тарасов. Дифракция электронов: структура и динамика свободных молекул и конденсированного вещества. ФИЗМАТЛИТ, Москва, 2013, 614 с.

В этой монографии подробно описана используемая диссертантом методика анализа данных газовой электронографии, включая исследование так называемых нежёстких молекулярных структур.

Однако приведённые замечания не влияют на высокую оценку представленного автореферата и диссертации, определённо раскрывающей глубокие знания Д.М. Ковтуна в области используемых методов анализа данных дифракции электронов, молекулярной спектроскопии, квантовой химии и структурной химии в целом.

Таким образом, диссертационная работа Ковтуна Дмитрия Михайловича является полноценным завершённым исследованием, и по своей актуальности, новизне, содержательности и практической значимости его результаты, бесспорно, соответствуют критериям, определенным пп. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова», а её автор заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Заведующий кафедрой аналитической химии имени И.П. Алимарина Института тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова МИРЭА - Российского технологического университета, доктор химических наук, профессор по специальности физическая химия

 / А. А. Ищенко /

Дата составления отзыва – 11 февраля 2024 г.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «МИРЭА – Российский технологический университет»

Почтовый адрес: Россия, ЦФО, 119571, Москва, проспект Вернадского, 86, комната О-226.

Телефон: +7 

E-Mail: 

Подпись А.А. Ищенко заверяю:

Заместитель Первого проректора Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «МИРЭА – Российский технологический университет»

 / Ю. А. Ефимова /  
