

Заключение диссертационного совета МГУ.014.3

по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

Решение диссертационного совета от « 1 » марта 2024 г. № 171

О присуждении Ковтуну Дмитрию Михайловичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация: «Внутримолекулярная динамика и равновесная структура многоатомных молекул на основе адиабатической теории возмущений и методов решения некорректных обратных задач» по специальности 1.4.4 – Физическая химия (химические науки) принята к защите диссертационным советом 15.12.2023, протокол № 168.

Соискатель Ковтун Дмитрий Михайлович 1961 года рождения окончил очную аспирантуру НИФХИ им. Л.Я. Карпова в 1987 г.

Соискатель работает техником в лаборатории электронографии молекул кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

Диссертация выполнена в лаборатории электронографии молекул кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

Научный руководитель - доктор физико-математических наук Тарасов Юрий Игоревич, заведующий кафедрой физики и технической механики Института тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет»

Официальные оппоненты:

Шлыков Сергей Александрович, доктор химических наук, доцент, Ивановский государственный химико-технологический университет, кафедра физической и коллоидной химии, заведующий кафедрой,

Беляков Александр Васильевич, доктор химических наук, профессор, Санкт-Петербургский государственный Технологический институт (Технический университет), кафедра общей физики, заведующий кафедрой,

Палюлин Владимир Александрович, кандидат химических наук, доцент, МГУ имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Кафедра медицинской химии и тонкого органического синтеза, НИЛ медицинской химии, ведущий научный сотрудник дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 20 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 5 работ, из них 5 статей в международных рецензируемых журналах, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus, RSCI и рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 1.4.4. – Физическая химия:

1. Тарасов Ю. И., Кочиков И. В., **Ковтун Д. М.**, Новосадов Б. К., Саакян А. С. Определение равновесной структуры жестких молекул электронографическим методом. Равновесная геометрическая конфигурация молекулы 1,2-тиаарсола по данным метода газовой электронографии и квантово-химических расчетов. // Журнал структурной химии. — 2004. — Т. 45, № 5. — С. 822–829. (Импакт-фактор РИНЦ 0.8, 0.54 п. л., вклад соискателя 50%.)
2. Хайкин Л. С., Грикина О. Е., Карасев Н. М., **Ковтун Д. М.**, Кочиков И. В. Электронографическое исследование равновесной структуры гексаметилентетрамина с использованием данных квантовой химии и колебательной спектроскопии // Журнал физической химии. — 2014. — Т. 88, № 4. — С. 638–642. (Импакт-фактор РИНЦ 0.740, 0.35 п. л., вклад соискателя 50%.)
3. Тарасов Ю. И., Кочиков И. В., **Ковтун Д. М.**, Поленов Е. А., Иванов А. А. Внутреннее вращение и равновесная структура молекулы 2-метил-2-нитропропана на основе совместной обработки данных газовой электронографии, колебательной и микроволновой спектроскопии, а также результатов квантово-химических расчетов // Журнал структурной химии. — 2017. — Т. 58, № 3. — С. 525–534. (Импакт-фактор РИНЦ 0.8, 0.85 п. л., вклад соискателя 50%.)
4. **Kovtun D. M.**, Kochikov I. V., Tarasov Y. I. Electron diffraction analysis for the molecules with multiple large amplitude motions. 3-nitrostyrene – a molecule with two internal rotors // The Journal of Physical Chemistry A. — 2015. — Vol. 119, no. 9. — P. 1657–1665. (JIF WoS 2.944, 0.75 п. л., вклад соискателя 75%.)
5. Kochikov I. V., **Kovtun D. M.**, Tarasov Y. I. Electron diffraction analysis for the molecules with degenerate large amplitude motions: Intramolecular dynamics in arsenic pentafluoride. // Journal of Molecular Structure. — 2017. — Vol. 1132. — P. 139–148. (JIF WoS 3.8, 1.11 п. л., вклад соискателя 60%).

На диссертацию и автореферат поступило 3 дополнительных отзыва, все положительные.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их компетентностью в области физической химии, молекулярной спектроскопии и квантовой химии, а также наличием большого количества публикаций в соответствующих областях исследований.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата химических наук является научно-квалификационной работой, в которой автором представлено исследование 5-ти молекул с помощью методики на основе адиабатической теории возмущений и методов решения некорректных обратных задач с использованием экспериментальных данных электронной дифракции (ЭД) и

молекулярной спектроскопии (МС), дополненных расчётами квантовой химии (КХ): 2-х жёстких (1,2-тиаарсол, уротропин) и 3-х нежёстких (2-метил-2-нитропропан с одномерным волчком; и впервые в электронной дифракции молекулы с двумя степенями свободы движений большой амплитуды (ДБА): 3-нитростирол с 2-мя волчками и пентафторид мышьяка с дважды вырожденным деформационным колебанием). Показано, что получаемая равновесная геометрия исследуемых молекул существенно не зависит от методов КХ, применяемых для построения исходной теоретической модели, уточняемой на основе экспериментальных данных, а для жёстких молекул хорошо воспроизводится методами КХ высокого уровня (CCSD(T)). Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

1. **Методика** на основе адиабатической теории возмущений и методов решения некорректных обратных задач позволяет уточнять параметры поверхностей потенциальной энергии (ППЭ) жёстких молекул на основе ангармонической модели движений малых амплитуд, получать  $r_e$ -структуры, сравнимые с методами КХ уровня пост Хартри-Фока и не зависящие от начального приближения КХ (1,2-тиаарсол, уротропин).

2. Эта же **методика** с использованием данных ЭД, МС и КХ на основе 1D модели ДБА для молекул с внутренним вращением позволяет: получать  $r_e$ -структуры, вращательные постоянные; определять положение барьера (2-метил-2-нитропропан).

3. Усовершенствование этой **методики** для молекул с несколькими координатами большой амплитуды разного типа (два разных волчка, дважды/трижды вырожденное деформационное колебание в средне и высоко симметричных молекулах) на многомерных ППЭ позволяет: повысить надежность интерпретации эксперимента и существенно расширить класс исследуемых нежёстких молекул, исследовать их динамику, определять  $r_e$ -структуру, оценивать содержание конформеров (3-нитростирол, AsF<sub>5</sub>).

На заседании 01.03.2024 диссертационный совет принял решение присудить Ковтуну Д. М. ученую степень кандидата химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 14 человек, из них 4 докторов наук по специальности 1.4.4 –Физическая химия (химические науки), участвовавших в заседании, из 21 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 14 , против – 0 , недействительных бюллетеней – 0 .

Председатель диссертационного совета  
Ученый секретарь диссертационного совета

Горюнков А.А.  
Шилина М.И.  
01.03.2024