

Отзыв научного руководителя

на диссертационную работу научного сотрудника лаборатории электронографии молекул кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова Ковтуна Дмитрия Михайловича на тему **«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 по химическим наукам.

Ковтун Дмитрий Михайлович окончил химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова в 1984 году, очную аспирантуру НИФХИ им. Л.Я. Карпова (лаборатория квантовой химии и статистической физики) – в 1987 г.

На химическом факультете МГУ в должности научного сотрудника работает с 1999 года. Активный участник создания методики определения равновесной структуры и изучения внутримолекулярной динамики свободных молекул на основе уточнения параметров поверхностей потенциальной энергии, и практического применения этой методики к решению обратных задач структурной химии по совокупности экспериментальных данных газовой электронографии и молекулярной спектроскопии. Актуальность исследований Ковтуна Д.М. подтверждается фундаментальностью полученных данных и внесением их в международные справочные базы. Разработанная методика, опирающаяся на адиабатическую теории возмущений и методы решения некорректных обратных задач, и идеи, лежащие в ее основе, применяются в исследовательской работе отечественных и зарубежных электронографических групп.

Ковтун Д.М. был инициатором распространения разработанной методики на исследования нежёстких молекул с несколькими координатами большой амплитуды как в виде простых волчков, так и в виде сложных деформационных колебаний. Это позволило существенно расширить класс изучаемых объектов и повысить надежность интерпретации эксперимента, впервые получить важные динамические данные и равновесные

геометрические параметры молекул, сложных для решения обратной структурной задачи. Всё это представлено в его диссертации.

Ковтуном Д.М. получен ряд новых и важных результатов. Усовершенствована методика и расширена область ее применимости на молекулы с несколькими координатами ДБА разного типа на многомерных ППЭ (3-нитростирол и AsF_5). На основе КХ расчётов построены ППЭ и молекулярные модели для уточнения динамических параметров и r_e -структур жёстких молекул 1,2-тиаарсола и уротропина в модели ДМА; нежёсткой молекулы 2-метил-2-нитропропана в 1D модели ДБА; молекул с двумя нежесткими координатами – 3-нитростирола и пентафторида мышьяка – в 2D модели ДБА. По экспериментальным данным уточнены построенные модели и получены r_e -структуры этих молекул.

Показано, что стартовые значения параметров молекулярной модели, формируемые на основе квантово-химических расчетов умеренного уровня, не оказывают существенного влияния на результаты структурного анализа, выполняемого по совокупности экспериментальных данных. Уточненные структурные параметры находятся в хорошем согласии с результатами квантово-химических расчетов уровня пост Хартри-Фока. Указанное согласие подтверждает надежность разработанной методики, и открывает широкие перспективы ее использования для молекул с большим числом атомов, для которых расчеты высокого уровня пока затруднены.

В 2005-2010 гг. Ковтун Д.М. являлся активным участником двух грантов РФФИ: № 05-03-33034 «Комплексный структурный анализ жестких и нежестких многоатомных молекул с учетом параметров внутримолекулярной функции потенциальной энергии» и № 08-03-01104 «Комплексный структурно-динамический анализ нежестких многоатомных молекул. Развитие теоретических и экспериментальных методов на основе параметров внутримолекулярной функции потенциальной энергии». С 2011 г. является исполнителем по госзаданиям, выполняемым кафедрой физической химии.

Результаты его научных исследований опубликованы в 20 статьях в российских и международных рецензируемых научных журналах, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus, RSCI, неоднократно представлялись на конференциях российского и международного уровня (всего – 25 докладов).

Ковтун Д.М. является высококвалифицированным специалистом в области вычислительной квантовой химии, решения несовместных обратных задач с комбинированным использованием данных молекулярной спектроскопии, электронной дифракции и квантовой химии. Он способен самостоятельно проводить научные исследования и творчески решать научные задачи.

Диссертационная работа Ковтуна Д.М. представляет собой целостное научное исследование, обладает научной новизной и практической значимостью. Она удовлетворяет требованиям пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова к работам, представленным на соискание ученой степени кандидата химических наук.

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук по специальности

02.00.04 – Физическая химия

Заведующий кафедрой

Кафедра физики и технической механики

Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова

ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет»

Проспект Вернадского, д. 78, корпус В, каб. В-423

Телефон: +7 499 600-80-80, доб. 33439

E-mail: Y.I.Tarasov@mitht.org

Дата составления отзыва: 19 сентября 2023 г.

Подпись руки

УДОСТОВЕРЯЮ:

Начальник Управления качества М.М. Бухарин

Тарасов Юрий Игоревич