

Отзыв

на автореферат диссертации Ковтуна Дмитрия Михайловича
«Внутримолекулярная динамика и равновесная структура
многоатомных молекул на основе адиабатической теории
возмущений и методов решения некорректных обратных задач»,
представленной Диссертационному Совету 014.3
на соискание ученой степени кандидата химических наук
по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Диссертационная работа Ковтуна Д.М. представляет собой объемное и интересное исследование, имеющее в равной степени фундаментальное и прикладное значение. Применение автором методики на основе адиабатической теории возмущений и методов решения некорректных обратных задач для решения структурно-динамической обратной задачи с использованием данных газовой электронографии и микроволновой спектроскопии, дополненных квантово-химическими расчетами, позволяет существенно расширить круг экспериментальных задач, включая возможность достаточно корректного описания внутримолекулярных движений с большой и малой амплитудой. Автором показано успешное применение данной методики на примере пяти молекул, отличающихся как по симметрии, так и по характеру внутримолекулярных движений. Усовершенствованная методика была успешно применена автором для определения равновесных параметров и исследования динамики молекул с несколькими нежесткими координатами разного типа (два разных волчка в случае 3-нитростирола, дважды/трижды вырожденное деформационное колебание в случае AsF_5).


Понимая затруднения автора, связанные с описанием столь обширного исследования в рамках ограниченного объема автореферата, все же отметим, что автором, к сожалению, не представлены условия проведения электронографических исследований. Так данные о температуре эксперимента приведены только для одного случая. В то же время, изменение температурных условий может существенно влиять на характер внутримолекулярных движений. Также из текста автореферата остается не понятной процедура «масштабирования ППЭ». Какие именно параметры масштабировались и на каком основании подбирались масштабирующие множители (см., например, табл.1)?

Сделанные замечания не умаляют достоинств работы. Судя по автореферату, публикациям автора и характеризуя работу в целом, считаю, что

проведенные в диссертационной работе Д.М.Ковтуна исследования по своей актуальности, научной новизне, объему и практической значимости полученных результатов соответствуют критериям, определенным пп. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова», а ее автор, Ковтун Дмитрий Михайлович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

профессор кафедры физики,
декан факультета неорганической химии и технологии
ФГБОУ ВО «Ивановский государственный
химико-технологический университет»,
д.х.н., доцент

 Белова Наталья Витальевна

153000 г. Иваново
Пр. Шереметевский, 7
Тел.+7 
belova@isuct.ru

Согласна на включение моих персональных данных в документы,
связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку

Подпись Беловой Н.В. заверяю

Проректор по НИР ФГБОУ ВО «Ивановский
государственный химико-
технологический университет»

 Гуцин Андрей Андреевич