

ОТЗЫВ

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

Понятие «молекулярная структура» является одним из ключевых в современной химии. В связи с этим работы, направленные на установление структуры конкретных молекул являются актуальными. Среди структурных исследований особое место занимают исследования молекул в газовой фазе. Являясь существенно более сложными и трудоемкими по сравнению с таковыми для кристаллического состояния, они приносят информацию, особая ценность которой заключается в том, что она относится к не искаженным коллективным взаимодействиям молекулам, как это имеет место в рентгеноструктурном анализе. Практически единственным прямым экспериментальным методом определения структуры свободных многоатомных молекул вне зависимости от их типа симметрии является газовая электронография. В качестве альтернативы этому методу выступают квантово-химические расчеты. Однако они позволяют предсказать лишь гипотетическую (не наблюдаемую) равновесную структуру, в то время как электронографический метод дает некую динамическую структуру, усредненную по всем заселенным при температуре эксперимента электронным, колебательным и вращательным, в том числе и конформационным, состояниям молекулы. В последнее время в химии равновесная структура рассматривается в качестве референсной, несмотря на то, что сравниваемые с ней экспериментально получаемые структурные параметры для каждого физического метода имеют свой физический смысл. Диссертационная работа Д.М.Ковтуна относится к серии исследований, в которых из электронографии равновесная структура устанавливается на основе экспериментальных данных посредством учета специфики ядерной динамики молекулы и квантово-химически рассчитываемых характеристик поверхности потенциальной энергии, т.е. появляется возможность корректного сопоставления экспериментальных и расчетных структурных параметров. При этом особая заслуга состоит в том, что данный подход распространяется на случай молекул с двумя деформационными степенями свободы, как правило, плохо описываемыми в рамках гармонического приближения при условиях проведенного эксперимента.

Научная новизна рассматриваемой диссертационной работы не вызывает сомнений, поскольку в ней наряду с усовершенствованием модели описания ядерной динамики при интерпретации данных электронографического эксперимента на основе адиабатической теории возмущений и методов решения некорректных обратных задач, представлены результаты структурных исследований молекул пяти соединений, выполненные на высоком теоретическом уровне. При этом модель с двумя волчками применялась впервые.

Диссертация Д.М.Ковтуна является интересным и полезным в плане развития методологии газовой электронографии и расширения базы структурных данных

исследованием. Можно согласиться с большинством научных положений, которыми оперирует автор. Однако в отдельных случаях хотелось бы видеть более четкие формулировки. Так, например, описывая специфику ядерной динамики молекулы, автор на качественном уровне фактически интуитивно вводит представление о движении малой и большой амплитуды (ДМА и ДБА), заранее подразделяя исследуемые молекулы на жесткие и нежесткие. С этой терминологией можно согласиться, лишь приняв некий количественный критерий, например, невозможность описать ядерную динамику молекулы в рамках приближения малых (гармонических) колебаний с точностью до погрешностей эксперимента. Очевидно, что любое ДМА превращается в ДБА при достижении соответствующей температуры пара.

В заключение считаю справедливым отметить, 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.

Гиричев Георгий Васильевич

доктор химических наук, профессор

научная специальность 02.00.04 – физическая химия,

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Ивановский государственный химико-технологический университет»

153000, Россия, г. Иваново, просп. Шереметевский, 7

кафедра физики

заведующий кафедрой

Тел. +7 (4932) 35-98-74,

Электронная почта: girichev@isuct.ru

20.02.2024

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

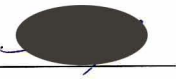
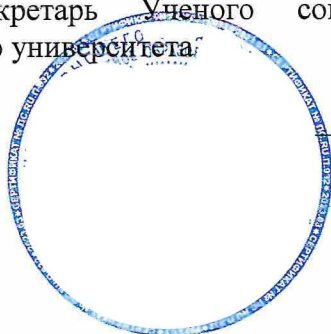


Подпись

Подпись Гиричева Г.В. удостоверяю

Ученый секретарь Ученого совета Ивановского государственного химико-технологического университета

20.02.2024



А.А. Хомякова