

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации на соискание ученой степени  
кандидата химических наук Засимова Павла Валерьевича  
на тему: «Экспериментальное моделирование радиационно-химических превращений  
некоторых астрохимически важных молекул C<sub>2</sub> и их комплексов  
при криогенных температурах»  
по специальности 1.4.4 – «Физическая химия»

Работа Засимова Павла Валерьевича посвящена исследованию путей радиационно индуцированных процессов перегруппировки и распада C<sub>2</sub> углеводородов, ацетальдегида, комплекса ацетилен с водой и монооксидом углерода в экспериментах матричной изоляции в матрицах Ne, Ar, Kr и Xe методами ИК/ЭПР спектроскопии, а также средствами *ab initio* моделирования. Для комплекса ацетилен с водой обнаружено образование соответствующего кетена и продуктов его распада — метана и монооксида углерода, а также енола в матрице Ar, для которых предложены возможные пути образования и механизмы распада. Наиболее подробное исследование механизма дано для фотоиндуцированного связывания ацетилен и CO, в котором интермедиаты процесса удлинения C<sub>2</sub> цепи исследовались ИК и ЭПР спектроскопией в том числе в допированных матрицах. С целью лучшей качественной идентификации основных путей реакции для анализа энергии возникающих в ходе перегруппировок стабильных соединений были задействованы методы квантовохимического рассмотрения на уровне CCSD(T)/CBS с коррекцией на энергии нулевых колебаний. Полученные результаты в результате квантовохимического моделирования дали вполне адекватную и соответствующую экспериментальным наблюдениям картину для относительной устойчивости интермедиатов. Наконец, ИК спектроскопия облученных образцов ацетальдегида в матрицах инертных газов, а также изотопзамещенных соединений позволила авторам получить представление об основных каналах распада, влиянии фотолиза и матричных эффектах и сделать предположения о возможных механизмах реакции, которые включают ионрадикальный путь, процесс разрыва C-C связи и тд, приводящие к распаду до метана и монооксида углерода, кетена и продуктов дегидрирования.

К работе можно сделать одно замечание. Применение метода CCSD(T) для расчета поверхности потенциальной энергии в широком диапазоне межатомных расстояний требует дополнительной валидации ввиду общих проблем применения однореференсных подходов.

Не вполне подходящий для изучаемых систем выбор квантовохимических подходов на одном из этапов исследования не умаляет бесспорной значимости диссертационного исследования Засимова Павла Валерьевича. Диссертация отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В. Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 1.4.4 – «Физическая химия» (по химическим наукам), а также критериям, определенным пп. 2.1–2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, а также оформлена, согласно приложениям № 5, 6 Положения о диссертационном совете Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Таким образом, соискатель Засимов Павел Валерьевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – «Физическая химия».

к.х.н., научный сотрудник  
НИЛ квантовой фотодинамики  
кафедры физической химии  
химического факультета  
МГУ имени М.В. Ломоносова

Клещина Надежда Николаевна

119991, г. Москва, ГСП-1, Ленинские  
горы, д.1, стр 3, Химический факультет  
МГУ имени М.В.Ломоносова, к. ц16

тел: телефона нет  
e-mail: nk@qpd.chem.msu.ru

Дата « 19 » декабря 2022 г.

