

Отзыв на автореферат диссертации

Засимова Павла Валерьевича

Экспериментальное моделирование радиационно-химических превращений некоторых астрохимически важных молекул C_2 и их комплексов при криогенных температурах

В работе Павла Валерьевича Засимова рассмотрены модельные процессы, происходящие под действием ионизирующего излучения с простыми углеродными молекулами. Аналогичные реакции, протекают в межзвездном пространстве при сверхнизких температурах и являются основой зарождения сложных органических молекул. Детальное понимание таких процессов важно для объяснения эволюции вещества и происхождения живой материи. Используемая автором методика матричной спектроскопии позволяет не только анализировать конечные стабильные продукты, образующиеся при воздействии на органические молекулы жесткого радиоизлучения, но и заглянуть внутрь процесса, обнаружить промежуточно образующиеся частицы и установить механизм реакции.

В ходе работы автором изучено поведение молекул ацетилена, этилена и этана под воздействием радиационного излучения, показано, что основным процессом, протекающим, в инертных матрицах является дегидрирование, а радиационная стойкость увеличивается с уменьшением числа атомов.

На основании данных анализа продуктов радиационного воздействия на комплексы ацетилена с водой методом ИК-спектроскопии обнаружено образование за счет присоединения кислорода новых частиц, которые при дальнейшем облучении распадались с разрывом связи C-C до CH_4 и CO.

Охарактеризованы различные пути радиационно-химических превращений комплекса ацетилена с окисью углерода протекающие с удлинением углеродной цепи. Неординарная задача решена автором по обнаружению и исследованию структуры промежуточно образующегося катион-радикала $H_2C_3O^+$. На основании данных ИК, ЭПР спектроскопии в сочетании с квантово-химическими расчетами высокого уровня установлены пути его изомеризации.

Интересным моментом являются рассмотренные автором основные закономерности и, в частности, влияние матричного окружения на разнообразные радиационно-химические превращения важного для астрохимии ацетальдегида.

Работа выполнена на высоком теоретическом и экспериментальном уровне с использованием обширного арсенала современных экспериментальных физико-химических и расчетных методов. Все представленные автором данные опубликованы в

виде 6 статей в высокорейтинговых зарубежных журналах. Текст написан хорошим языком, материал изложен ясно и логично.

В то же время в приведенной работе имеются некоторые неточности:

Стр. 16. Непонятна фраза “Результаты выполненных в рамках этой работы квантово-химических расчётов (рисунок 5) демонстрируют, что сигнал «А» отвечает интермедиату с брутто-формулой $H_2C_3O^{+}$ ”. (Из рисунка 5 следует, что для катион-радикала $H_2C_3O^{+}$ возможно существование ряда стабильных изомерных структур, а как это связано с сигналом А непонятно).

Там же “На катионную природу интермедиата также указывают эксперименты с акцептором электронов (рисунок 6)” (может быть следовало сказать что интенсивность сигналов А увеличивается при добавлении акцептора и не приводить ссылку на рисунок 6, т.к. там без комментария неясно).

Стр. 18. Рисунок 7. Приведен спектр в) после выдерживания образца в течение 20 мин – нулевая линия (Можно было сказать, что вне воздействия изменений в спектре не происходит).

Приведенные замечания не влияют на высокую положительную оценку диссертационной работы и ни в коей мере не снижают научной и практической значимости проведенных исследований.

В целом, диссертационная работа Павла Валерьевича Засимова, несомненно, является законченным научным исследованием, выполненным на высоком уровне. Проведенные 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 Павел Валерьевич Засимов достоин присуждения ученой степени кандидата наук по специальности 1.4.4 – «Физическая химия».

Баскир Эсфирь Григорьевна

Кандидат химических наук, старший научный сотрудник

ФГБУН Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН

1119991 Москва, Ленинский пр. 47.

Лаборатории химии карбенов и других нестабильных молекул

телефон 8 (499) 135-89-41

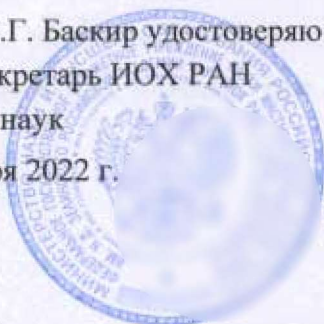
bas@ioc.ac.ru

Подпись Э.Г. Баскир удостоверяю:

Ученый секретарь ИОХ РАН

канд. хим. наук

8 декабря 2022 г.



И. К. Коршевец