

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата химических наук Волосатовой Анастасии Дмитриевны
на тему: «Механизмы радиационно-индуцированного синтеза и эволюции молекул простых
нитрилов и их возможная роль в холодных астрохимических превращениях»
по специальности 1.4.4 – «Физическая химия»

Диссертация Волосатовой А. Д. посвящена исследованию путей радиационного превращения релевантных для химии межзвездного вещества азоторганических соединений, в ряду которых рассмотрены нитрилы и продукты их фотолиза, включающие реакции в присутствии воды, N_2O и CO_2 . С применением ИК спектроскопии продуктов радиолиза и пострадиационного фотолиза матрично-изолированных соединений в матрицах инертных газов Ar, Kr и Xe исследовались продукты и интермедиаты радиационного распада двухуглеродных нитрилов и углеводородов в комплексах с водой, циановодородом и аммиаком. При этом применении методики матричной изоляции было сделано для экспериментального моделирования влияния среды. Для ацетонитрила были описаны процессы фотоизомеризации продуктов излучательного дегидрирования в видимой области и мягком УФ, а анализ временных разверток степеней конверсии и изучение реакций с изотоп-замещенными соединениями позволили частично подтвердить предполагаемый механизм радиолиза его комплекса с водой. Были рассмотрены основные пути фотолиза пропилового нитрила и комплекса метана с циановодородом. При этом для последнего было обнаружено существенное влияние матрицы на изомерное отношение продуктов: ацетонитрила и изоацетонитрила. Наконец, аналогичный анализ проводился для комплексов этана, этилена и ацетилен. С целью неэмпирической валидации предположений о механизмах процессов радиолиза для части упомянутых соединений были задействованы методы квантовохимического описания изолированных реагентов, продуктов, а также интермедиатов в рамках методов MP2 и CCSD(T). Несмотря на ряд проблем этих методов, связанных с описанием интермедиатов, данные техники со всеми предостережениями и учетом хорошей экспериментальной базы диссертационной работы могут быть применены при качественном описании геометрий и энергетических характеристик соответствующих соединений.

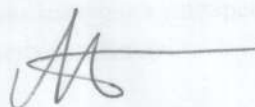
К замечаниям к тексту автореферата можно отнести не очень подробное изложение перехода от межзвездного вещества, которым в случае реальных объектов чаще всего являются водные льды к изоляции в инертных газах. Также недостаточное внимание в тексте автореферата уделено обоснованию выбора метода квантово-химического моделирования, а также влиянию приближений, учитывающих колебательные вклады в результаты расчетов.

Вместе с тем, указанные замечания не умаляют значимости диссертационного исследования. 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 Волосатова Анастасия Дмитриевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – «Физическая химия».

к.ф.-м.н., доцент
НИЛ квантовой фотодинамики
кафедры физической химии
химического факультета
МГУ имени М.В. Ломоносова

Безруков Дмитрий Сергеевич



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: dbezrukov@qpd.chem.msu.ru

Дата «19» сентября 2022 г.

