

Отзыв на автореферат диссертации Засимова Павла Валерьевича
«Экспериментальное моделирование радиационно-химических превращений некоторых астрохимически важных молекул C₂ и их комплексов при криогенных температурах»,
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Диссертация Павла Валерьевича Засимова посвящена исследованию механизмов радиационно-химических превращений астрохимически важных молекул, содержащих два атома углерода, и комплексов одного из этих соединений, ацетилена, с водой и монооксидом углерода с помощью методов матричной ИК- и ЭПР-спектроскопии и квантово-химических расчетов высокого уровня. В ходе работы был выявлен ряд закономерностей изученных радиационно-химических превращений, описаны их механизмы. Кроме того, впервые обнаружен и охарактеризован катион-радикал E-HCCNCO⁺, найдено, что данный катион-радикал способен перегруппировываться в катион-радикал H₂CCCO⁺⁺ под действием света с $\lambda = 400\text{--}445$ нм. Впервые зарегистрировано протекание темновой реакции между метильным радикалом и CO в Xe, которая приводит к образованию ацетильного радикала. Полученные автором результаты характеризуются высокой научной новизной и имеют несомненную практическую значимость. Они являются существенным вкладом в химию лабильных интермедиатов, радиационную химию и астрохимию.

По существу материала, представленного в автореферате, замечаний нет. Тем не менее, хотелось бы обратить внимание автора на некоторые опечатки и неточности, имеющиеся в тексте автореферата.

До сих пор в отечественной литературе, слово "сигнал" не считалось синонимом слова "полоса" (см. стр. 14, абзац 1; стр. 15, предпоследний абзац; стр. 16, последний абзац).

На стр. 16 (последний абзац) сообщается, что "Результаты выполненных в рамках этой работы квантово-химических расчётов (рисунок 5) демонстрируют, что сигнал «A» отвечает интермедиату с брутто-формулой H₂C₃O⁺⁺." Данное высказывание требует дополнительных пояснений, поскольку установление брутто-формулы на основе квантово-химических расчетов представляется весьма необычной задачей.

На стр. 18, абзац 1: "... фотолиз ... приводит к уменьшению интенсивности полосы поглощения «A» и появлению новой неидентифицированной полосы поглощения с максимумом при 2198.6 cm⁻¹ ...", а в последнем абзаце на той же стр.: "В ЭПР-спектре облучённого образца зарегистрирован ряд новых, ранее неидентифицированных сигналов, которые отсутствуют в образцах, не содержащих CO." Слово "неидентифицированный" в

этих предложениях вводит читателя в заблуждение, поскольку ниже эти ИК-полосы и ЭПР-сигналы идентифицируются, а ранее, насколько можно судить, они не только не были идентифицированы, а, в действительности, просто не наблюдались.

В выводе 5 слово "восстановление" весьма не удачно, поскольку вызывает ненужную ассоциацию с электрохимическим восстановлением.

Перечисленные замечания не касаются существа выполненной работы и не уменьшают ее значение. В целом, диссертационная работа Засимова Павла Валерьевича, несомненно, является законченным научным исследованием, выполненным на очень высоком уровне. По поставленным задачам, уровню их решения, актуальности, научной новизне, объему и практической значимости полученных результатов данная работа полностью соответствует критериям, определенным пп. 2.1–2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном бюджетном учреждении науки Института органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук (ИОХ РАН)», а ее автор – Засимов Павел Валерьевич, безусловно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Ст. науч. сотр. лаб. № 1

Федерального государственного бюджетного учреждения науки

Института органической химии им. Н. Д. Зелинского

Российской академии наук (ИОХ РАН),

кандидат химических наук

г. Москва, 119991, Ленинский проспект, 47;

тел.: +7 (499) 1358941;

e-mail: bog@ioc.ac.ru

Боганов Сергей Евгеньевич

Подпись к.х.н. С. Е. Боганова заверяю,

Ученый секретарь ИОХ РАН

кандидат химических наук

08 декабря 2022 г.

И. К. Коршевец

