

Отзыв на автореферат диссертации

Волосатовой Анастасии Дмитриевны

Механизмы радиационно-индуцированного синтеза и эволюции молекул простых нитрилов и их возможная роль в холодных астрохимических превращения

Диссертация Анастасии Дмитриевны Волосатовой посвящена изучению химических процессов, происходящих с простейшими нитрилами при воздействии радиационного излучения. Подобные реакции протекают в комическом пространстве, поэтому их детальное исследование имеет важное значение для астрохимии. Метод матричной изоляции, используемый в работе, позволяет воспроизводить модельные реакции, происходящие при облучении. Сочетание спектроскопических данных с расчетными методами дает информацию о структуре, характеристиках участвующих частиц и механизме протекающих процессов.

На основании анализа продуктов радиолиза ацетонитрила показано, что основными конечными продуктами при высокой степени конверсии являются радикалы $\text{CCN}^{\bullet}$ и $\text{CNC}^{\bullet}$, образующиеся при последовательном дегидрировании $\text{CH}_2\text{CN}^{\bullet}$ и $\text{HCNC}^{\bullet}$. Селективное фотохимическое превращение $\text{CNC}^{\bullet}$ в $\text{CCN}^{\bullet}$ наблюдалось при облучении видимым светом, а обратная фотоизомеризация – при воздействии света в УФ диапазоне.

Автором установлено, что радиолиз комплекса $\text{CH}_3\text{CN}\cdots\text{H}_2\text{O}$ в матрице аргона приводит к образованию ацетамида с промежуточным образованием ацетимидной кислоты.

Сравнительный анализ радиационно-химических превращений пропилового нитрила и ацетонитрила показал, что главным отличием в случае более сложной молекулы является наличие дополнительного канала разложения в виде фрагментации углеродной цепи с образованием новых межмолекулярных комплексов.

Логическим продолжением этой работы являлось изучение комплексов ряда простых молекул (CH_4 , C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6) с HCN и продуктов и радиационно-химических превращений. При этом впервые были идентифицированы новые комплексы $\text{CH}_4\cdots\text{HNC}$ и $\text{C}_2\text{H}_6\cdots\text{HCN}$, $\text{C}_2\text{H}_6\cdots\text{HNC}$.

Интересные результаты были получены при анализе продуктов радиолиза комплекса $\text{C}_2\text{H}_2\cdots\text{NH}_3$. На основании спектров изотопно-замещенных молекул и квантово-химических расчетов аргументированно доказано образование нового радикал-молекулярного комплекса $\text{C}_2\text{H}_2\cdots\text{NH}_2^{\bullet}$, который может являться интермедиатом процесса превращения исходного комплекса в азотсодержащие соединения.

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 5 статей в высокорейтинговых зарубежных журналах и 3-х тезисов докладов.

В тексте автореферата замечены некоторые стилистические и оформительские неточности: 1) На рисунке 2 указано время фотолиза 50 мин, в подписи 15 мин. 2) На рисунке 3 шкала представлена в разных диапазонах, поэтому трудно сопоставить образующиеся в разных условиях продукты.

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

В целом, диссертационная работа Анастасии Дмитриевны Волосатовой, 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 Анастасия Дмитриевна Волосатова также достойна 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

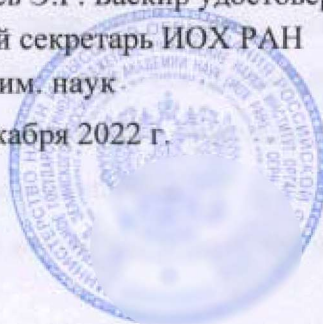
bas@ioc.ac.ru

Подпись Э.Г. Баскир удостоверяю:

Ученый секретарь ИОХ РАН

канд. хим. наук

8 декабря 2022 г.



И. К. Коршевец