

ОТЗЫВ официального оппонента
на диссертацию на соискание ученой степени
кандидата химических наук
Рязанцева Сергея Викторовича на тему: «Механизмы радиационно-
индущированного синтеза и разложения кислородсодержащих органических
молекул и радикалов при криогенных температурах»
по специальности 02.00.09 – «химия высоких энергий»

Исследование механизмов химического превращения простых неорганических молекул, таких как H_2O , CO_2 и CO , замороженных в матрицах инертных газов в активные органические соединения под действием жесткого электромагнитного излучения представляет как фундаментальных научный, так и общечеловеческий интерес, прежде всего, с точки зрения понимания временной эволюции химического вещества Вселенной в астробиологическом контексте. Исследуемые в диссертации простейшие неорганические и органические молекулы активно участвуют в различных физико-химических процессах в верхних слоях планетарных атмосфер, а также являются компонентами межзвездной среды и кометных льдов. Изучение процессов радиационно-индущированного синтеза и разложения молекул в условиях низких температур и глубокого вакуума принципиально важно для детального установления механизмов химических реакций, протекающих в космическом пространстве и составляет основную задачу “лабораторной астрохимии”. В этой связи работа С.В. Рязанцева, по экспериментальному моделированию радиационно-индущенных процессов синтеза и разложения кислородсодержащих органических молекул и радикалов при криогенных температурах, является безусловно актуальной.

С фундаментальной точки зрения особую значимость работе придает новая спектроскопическая информация, полученная о строении, радиационных и кинетических свойствах исследуемых интермедиаторов, а также роли слабых

межмолекулярных взаимодействий в радиационно-индуцированных превращениях. Уникальные экспериментальные данные несомненно потребуют дальнейшего теоретического осмысления.

Ночная новизна представленной работы заключается, прежде всего, в том, что в ней впервые обнаружено образование радикала НОСО при облучении систем $H_2O/CO_2/Ng$ и $H_2O/CO/Ng$, а также исследованы радиационно индуцированные превращения молекул НСООН в низкотемпературных матрицах инертных газов и обнаружена ранее неизвестная для конденсированной фазы реакция распада НСООН $\rightarrow HCOO + H$. Новые неожиданные результаты были получены при исследовании конформационных превращений изотопо замещенного радикала $H(D)OCO$, которые протекают как под действием ИК-излучения, так и за счет туннелирования атома водорода (дейтерия) через потенциальный барьер. Изюминкой работы является уникальные измерения абсолютных коэффициентов поглощения в ИК-спектре трехтомного радикала НСО, которые количественно не согласуются с данными неэмпирических квантовохимических расчетов высокого уровня.

Полученные в работе экспериментальные результаты являются весомым вкладом в развитие фундаментальных представлений о механизме протекания радиационно индуцированных реакций простейших неорганических соединений в инертной среде при очень низких температурах, что принципиально важно для понимания существенно не тепловых физико-химических условий синтеза и деструкции органических соединений на различных этапах космической эволюции.

Диссертационная работа С.В. Рязанцева является законченным научным исследованием, отличается высокой степенью научной новизны, выполнена на профессиональном экспериментальном уровне с использованием современных методов радиационной химии, фотохимии и молекулярной спектроскопии в условиях матричной изоляции. Поставленная автором задача - установление механизмов радиационно-индуцированных реакций в модельных системах $H_2O/$

CO_2/Ng , $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}/\text{Ng}$ и HCOOH/Ng (Ng = благородный газ), протекающих при криогенных температурах - в работе решена. Достоверность полученных данных сомнений не вызывает. Автореферат диссертации соответствует ее содержанию. Полученные результаты достаточно полно отражены в публикациях (6 статей в рецензируемых журналах, индексируемых в базах данных Web of Science и SCOPUS) и доложены на научных конференциях.

При знакомстве с диссертационной работой и авторефератом у меня возникло несколько замечаний:

1. В какой степени используемая в работе низкотемпературная матрица инертных газов адекватна составу и условию образования молекулярных мантий космических льдов?
2. Насколько механизм радиолиза, по сравнению с фотолизом, специчен к составу используемой матрицы?
3. Какова основная причина значительного расхождения измеренных и рассчитанных абсолютных коэффициентов поглощения фундаментальных колебаний радикала HCO ?
4. Как измеренные кинетические параметры ИК-стимулированной и туннельной цис-транс изомеризации молекулы HOOC согласуются со структурными параметрами данной молекулы?
5. Основные выводы диссертации 5 и 6, по-видимому, можно объединить?

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 02.00.09 – «химия высоких энергий» (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 Рязанцев Сергей Викторович заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.09 – «химия высоких энергий».

Официальный оппонент:

доктор физико-математических наук

Столяров Андрей Владиславович



Наименование организации:

Федеральное государственное бюджетное учреждение высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

Должность: заведующий кафедрой лазерной химии Химического факультета

Адрес: 119991, Москва, Ленинские Горы, 1, стр.3.

Телефон: +7-495-939-12-93

Адрес электронной почты: avstol@laser.chem.msu.ru

Специальность, по которой официальным оппонентом

защищена диссертация: 02.00.17 - Математическая и квантовая химия
«15» декабря 2017 г.