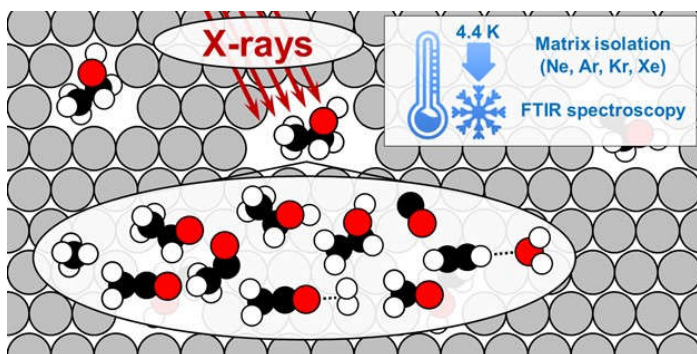


## Радиационная химия изолированных молекул этанола в инертных криогенных матрицах: влияние среды на высокоэнергетические превращения.

Этанол – одно из важнейших простых соединений, используемых в различных областях человеческой деятельности, в том числе, в полях ионизирующих излучений и широко представленное в атмосфере. Сравнительно недавно этанол был обнаружен в ряде «холодных» космических объектов, что стимулировало интерес к радиационно-химическим превращениям этанола при криогенных температурах, поскольку он рассматривается в качестве одной из ключевых молекул в молекулярной эволюции космического вещества, приводящей в конечном итоге к образованию сложных соединений и биомолекул.

В модельных исследованиях, выполненных в лаборатории химии высоких энергий кафедры электрохимии химического факультета МГУ были впервые проанализированы первичные продукты радиационно-химических превращений изолированных молекул этанола в матрицах твёрдых благородных газов с различными физическими характеристиками при температурах ниже 10 К. Экспериментальные исследования с помощью комбинации методов ЭПР и ИК спектроскопии были проведены с использованием оригинальных методик и уникального комплекса оборудования при поддержке неэмпирических квантово-химических расчётов. Установлено, что при облучении наблюдается образование широкого круга радикальных и молекулярных продуктов, отвечающих разрыву С-Н и С-С связей, причём соотношение различных каналов существенно зависит от физических характеристик инертной среды. Так, в относительно поляризуемой ксеноновой матрице преобладают продукты дегидрирования – в первую очередь,  $\alpha$ -гидроксиэтильный радикал ( $\text{CH}_2\dot{\text{C}}\text{HOH}$ ) и ацетальдегид, в то время как в матрицах с высоким потенциалом ионизации и низкой поляризуемостью (аргон, неон) доминируют продукты разрыва С-С связей. Полученный результат может иметь важное значение для развития фундаментальных представлений радиационной химии конденсированных сред и понимания механизмов астрохимических процессов. Обнаружена нетривиальная динамика  $\alpha$ -гидроксиэтильного радикала при температурах 10-65 К. Кроме того, впервые проведено предварительное отнесение некоторых полос в колебательном спектре этого радикала, который может быть ключевым интермедиатом в окислительных трансформациях этанола (от астрохимии до систем преобразования энергии).



Результаты исследований отражены в двух статьях, опубликованных в журнале *Physical Chemistry Chemical Physics* (обе статьи включены в Collection of Hot Articles журнала):

1. P.V. Zasimov, E.V. Sanochkina, D.A. Tyurin, V.I. Feldman. An EPR study on the radiolysis of isolated ethanol molecules in solid argon and xenon: matrix control of radiation-induced generation of radicals in cryogenic media. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2023, V. 25, pp. 4624-4634.
2. P.V. Zasimov, E.V. Sanochkina, D.A. Tyurin, V.I. Feldman. Radiation-induced transformations of matrix-isolated ethanol molecules at cryogenic temperatures: an FTIR study *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2023, V. 25, pp. 21883-21896.

Область наук: химия и науки о материалах