**Радиационно-индуцированные превращения изолированного комплекса C6H6...HCN: возможный механизм синтеза межзвездного бензонитрила**

***Гагонова М.Ю., Тюрин Д.А., Баранова И.А., Фельдман В.И.***

*Аспирант, 1 год обучения*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: andrianova-ma@yandex.ru*

Недавнее обнаружение бензонитрила (C6H5CN) [1] в межзвездной среде считается одним из важных открытий в области астрохимии и молекулярной астрофизики. Однако механизм его образования в межзвездных льдах остается неясным. В данной работе было проведено экспериментальное моделирование возможности одностадийного радиационно-индуцированного синтеза бензонитрила из изолированного межмолекулярного комплекса C6H6···HCN под действием рентгеновского излучения в жестком инертном окружении при криогенной температуре (4.5 К). Исходный комплекс и продукты его превращений были охарактеризованы с помощью Фурье ИК (инфракрасной)-спектроскопии в матрице твердого криптона.

Образование комплекса C6H6···HCN в криптоновой матрице было установлено на основе сравнения сдвигов фундаментальных полос поглощения HCN и С6H6 в ИК-спектре с результатами квантово-химических расчетов на уровне теории riMP2/L2a\_3. Согласно расчетам, в этом межмолекулярном комплексе водородная связь образуется между атомом водорода HCN и одним из атомов углерода C6H6.

Синтез бензонитрила подтвержден непосредственным наблюдением трех из четырех его наиболее интенсивных полос поглощения, причем две из них оказались расщеплены на дублеты — вероятно, вследствие возмущения, связанного с образованием молекулы
H2 в одной матричной клетке с бензонитрилом. Идентификация дополнительно подтверждена экспериментами с дейтерированным бензолом.

Предположительно, C6H5CN образуется в результате дегидрирования возбужденного комплекса C6H6···HCN с последующей быстрой рекомбинацией образовавшихся радикалов внутри матричной клетки. Предложенный механизм синтеза бензонитрила может реализоваться как в объеме астрофизических льдов, так и на поверхности зерен межзвездной пыли.

Рис. 1. Фрагменты инфракрасных спектров осажденного и облученного образца C6H6/HCN/Kr (2:1:1000) при 4.5 К, подтверждающие радиационно-индуцированный синтез C6H5CN из C6H6···HCN

*Работа выполнена при поддержке государственного бюджета на научные исследования в МГУ имени М. В. Ломоносова (проект № АААА-А21-121011590088-4). Выражаем благодарность И. В. Тюльпиной за вклад в экспериментальную методику и Межведомственному суперкомпьютерному центру Российской академии наук (МСЦ РАН) за предоставление вычислительных ресурсов.*

**Литература**

1. McGuire, B. A.; Burkhardt, A. M.; Kalenskii, S.; Shingledecker, C. N.; Remijan, A. J.; Herbst, E.; McCarthy, M. C. Detection of the aromatic molecule benzonitrile (c-C6H5CN) in the interstellar medium // Science 2018. Vol. 359 (6372). P. 202−205.