

## О Т З Ы В

на автореферат диссертации Пневской Анны Юрьевны на тему «Экспериментальное и теоретическое исследование сорбции этилена и 1-метилциклопропена в металлоорганических каркасных структурах», выдвигаемую на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук 2.6.6. Нанотехнологии и наноматериалы (физико-математических науки)

В исследовании А. Ю. Пневской рассмотрены теоретические и экспериментальные аспекты синтеза и физико-химического анализа характеристик нанопористых материалов. Ключевой элемент научной новизны заключается в установлении закономерностей и механизмов сорбционного взаимодействия молекул этилена, воды и 1-метилциклопропена с активными центрами металл-органических каркасных структур. Несмотря на ожидаемую термодинамическую предпочтительность связывания указанных соединений с координационно-ненасыщенными металлическими центрами, зависимость энергии адсорбции от типа катиона и структурных особенностей каркаса оказалась нелинейной и потребовала детального изучения.

Выявленные корреляции позволили определить наиболее эффективные сорбенты для решения прикладной задачи – регулируемой доставки ингибитора роста растений (1-метилциклопропена). Интерпретация полученных данных стала возможной благодаря комплексному применению *in situ* спектроскопических методов, а также компьютерного моделирования электронной и пространственной структуры металл-органических соединений в условиях динамического сорбционно-десорбционного процесса.

**В ходе выполнения исследования впервые:**

1. Выполнен расчетный скрининг энергии адсорбции молекул воды, этилена и 1-метилциклопропена (1-МЦП) на металлических центрах структур типа  $M_3(BTC)_2$  (где  $M = Cu, Co, Ni, Zn, Fe, Mg, Mn$ ).
2. Разработан инновационный подход к синтезу металл-органических каркасов Cu-CPO-27 и Co-FA с применением микрофлюидных технологий и регулируемого давления в реакционной системе.

3. Экспериментально и методами квантово-химического моделирования установлены структурные особенности координации молекул этилена и 1-МЦП с медными центрами в металл-органическом каркасе HKUST-1.
4. Проведен количественный анализ кинетики десорбции этилена из медных центров HKUST-1 методом ИК-спектроскопии *in situ*.
5. Определена локальная атомная структура металлических центров в HKUST-1 в ходе процессов адсорбции и десорбции этилена.
6. Разработана методика *in situ* инкапсуляции 1-МЦП в структуру металл-органического каркаса.

Несмотря на высокий уровень исследования, можно отметить несколько замечаний:

1. В представленном автореферате недостаточно подробно освещены преимущества разработанных методов по сравнению с существующими аналогами.
2. МОК демонстрируют существенно более высокие показатели физико-химических характеристик в сравнении с традиционными пористыми материалами, такими как цеолиты, силикоалюмофосфаты, оксиды кремния и алюминия. Однако их синтез требует значительно более высоких материальных затрат. Это приводит к многократному увеличению себестоимости МОК по сравнению с указанными коммерчески доступными аналогами. В диссертационной работе недостаточно освещены вопросы масштабирования технологии.
3. В диссертационном исследовании не представлены систематические данные, характеризующие долговременную стабильность функциональных свойств МОК при их эксплуатации: кинетика изменения сорбционной емкости при многократных циклах адсорбции-десорбции, изменение удельной поверхности, химическая стабильность.

Данные замечания носят рекомендательный характер и не влияют на общую высокую оценку диссертационной работы. Диссертация представляет собой завершённую научно-исследовательскую работу на актуальную тему. Научные результаты, полученные Пневской А. Ю., имеют существенное

значение для области нанотехнологий и наноматериалов. Выводы и рекомендации достаточно обоснованы. Диссертационная работа отвечает всем требованиям Положения ВАК России о порядке присуждения ученых степеней, предъявляемым к диссертациям, а её автор Пневская Анна Юрьевна заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 2.6.6. Нанотехнологии и наноматериалы (физико-математических науки).

Кандидат химических наук, старший научный сотрудник лаборатории №4 «Химии углеводов» ФГБУН Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН

Наранов Евгений Русланович

15.08.2025

Подпись Наранова Е.Р. заверяю

Ученый секретарь ИНХС РАН  
д.х.н., доцент



Костина Юлия Владимировна