

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)

Диссертационная работа Анны Юрьевны Пневской посвящена актуальной и значимой задаче — исследованию сорбционных свойств металлоорганических каркасных структур (МОК) в отношении таких важных с точки зрения агропромышленного комплекса газов, как этилен и 1-метилциклопропен (1-МЦП). Работа выполнена на высоком научном уровне и представляет собой комплексное исследование, сочетающее экспериментальные методы *in situ* диагностики и теоретическое моделирование на основе теории функционала плотности (DFT).

Целью диссертационного исследования являлось определение атомной и электронной структуры взаимодействия этилена и 1-МЦП с открытыми металлическими центрами в МОК, а также разработка методологии контроля сорбции и десорбции этих молекул для возможного применения в технологиях продления свежести сельскохозяйственной продукции.

Автором получены следующие научно значимые и оригинальные результаты:

- впервые проведён теоретический скрининг энергий связывания этилена, 1-МЦП и воды с открытыми металлическими центрами в МОК типа $M^{\square}(BTC)^{\square}$, что позволило определить закономерности селективной сорбции и предложить критерии выбора перспективных материалов;

- впервые установлен тип и характер связи между молекулами этилена и 1-МЦП с металлическими центрами МОК, на примере HKUST-1, для которого связывание молекул этилена и 1-МЦП было подтверждено экспериментальным путем, показано формирование π -ковалентной связи между p -орбиталями атомов углерода и dz^2 -орбиталями меди;

- на основе *in situ* XAS данных, дополненных теоретическими спектрами, установлены особенности локальной атомной и электронной структуры медных центров в HKUST-1 в процессе адсорбции этилена, показано, что активация материала приводит к частичному восстановлению меди, однако при адсорбции этилена степень окисления Cu^{2+} сохраняется, а

изменения в XANES-спектрах незначительны, что указывает на слабое влияние этилена на электронную структуру центра.

Полученные результаты имеют существенную научную и практическую значимость. Они углубляют понимание механизмов молекулярного взаимодействия в нанопористых материалах и открывают перспективы создания новых систем контролируемого высвобождения ингибиторов созревания для применения в пищевой промышленности и логистике сельхозпродукции.

Несмотря на высокий уровень исследования, в отношении автореферата можно сформулировать несколько замечаний:

1. Для проведения экспериментов в режиме *in situ/operando* важное значение имеет время накопления сигнала для одного измерения, так как это определяет перспективы повышения временного разрешения эксперимента. В настоящей работе *in situ* эксперимент был проведен на лабораторном XAS спектрометре, что само по себе представляет отдельный интерес. Однако, в автореферате приведены спектры для конечного состояния (после активации, после взаимодействия с C_2H_4). Представляется целесообразным уточнить, сколько времени занимает измерение одного спектра на лабораторном источнике, а также оценить возможность наблюдения эволюции спектров в процессе нагрева (активации) или насыщения образца этиленом, например за счет проведения экспериментов не на лабораторном, а на обладающем большей яркостью синхротронном источнике.

2. При *in situ* активации 1-МЦП из его источника могут образовываться побочные продукты, такие как вода и углекислый газ. В тексте автореферата отсутствует информация о том, проводились ли попытки очистки газовой фазы для повышения конкурентной адсорбции исследуемых молекул на металлических центрах металлоорганических структур.


Стоит отметить, что данные замечания не снижают научной ценности диссертационной работы и носят, скорее, характер предложений по дальнейшему развитию работы.

Диссертация представляет собой законченную научно-исследовательскую работу на актуальную тему. Результаты, полученные Пневской А.Ю., имеют существенное значение как с точки зрения развития фундаментальной науки, в части получения новых знаний об атомарном строении многокомпонентных соединений, так и для прикладных применений, для наномасштабной диагностики в сфере агропромышленных технологий. Представленные в работе 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).

Марченков Никита Владимирович,
Заместитель директора по проектам мегасайенс,
кандидат физико-математических наук,
специальность 1.3.20 – кристаллография,
физика кристаллов, доцент
НИЦ «Курчатовский институт»,
Россия, г. Москва, пл. Академика Курчатова, 1,
nrcki@nrcki.ru, +7 (499) 196–95–39

27.08.2025



Марченков Н.В.

Подпись Марченкова Н.В. заверяю

Заместитель директора,
– главный ученый секретарь
НИЦ «Курчатовский институт»



Алексеева О.А.