

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Художиткова Александра Эдуардовича
«Исследование молекулярной подвижности углеводородов в микропористых металл-
органических каркасах методом ^2H ЯМР спектроскопии»,
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-
математических наук по специальности 01.04.17 – химическая физика, горение и
взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Научная работа Художиткова Александра Эдуардовича посвящена исследованию динамике линкера металл-органического каркаса MIL-53 в присутствии пара-ксилола и орто-ксилола методом ^2H ЯМР спектроскопии твердого тела. В ходе работы было выявлено влияние типа абсорбированной молекулы на подвижность линкера, в присутствии орто-ксилола линкер вращается в 10 раз медленнее, чем в присутствии пара-ксилола, что отражает степень взаимодействия изомера с каркасом. Степень взаимодействия каждого изомера с металл-органического каркасом была независимо подтверждена температурами, при которых начинается десорбция гостевых молекул и разрушение димеров. Также проанализированы возможные моды движения и активационные барьеры для изомеров ксилола: пара-ксилол демонстрирует более сложную динамику движений, чем орто-ксилол, которому доступны только либрационные движения. Стоит отметить комплексный подход автора по интерпретации полученных результатов, ясно обозначены корреляции с литературными данными по рассеянию нейтронов, данными динамической сканирующей калориметрии и молекулярной динамики. Можно отметить комментарий к работе:

На рис. 4 автором приведены зависимости величины активационного барьера для изотропного вращения и диффузии линейных алканов внутри ZIF-8 от длины углеводородной цепи. Хотелось бы на графиках увидеть усы ошибок, чтобы оценить погрешность расчетов и понять, насколько достоверна независимость энергии скорости вращения для алканов с длиной цепью. Возможно, предположение автора о сворачивании длинных цепей в клубок можно подтвердить расчетами структуры с помощью МД.

Считаю, что диссертационная работа «Исследование молекулярной подвижности углеводородов в микропористых металл-органических каркасах методом ^2H ЯМР спектроскопии» отвечает критериям п.9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г., а ее автор, Художитков Александр Эдуардович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Иванов Михаил Юрьевич

кандидат физико-математических наук

специальность 01.04.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

научный сотрудник лаборатории ЭПР спектроскопии

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт «Международный томографический центр» Сибирского отделения Российской академии наук (МТЦ СО РАН)

630090, Россия, г.Новосибирск, ул. Институтская, д.3а

Тел. 8(383) 333-14-48 ,



Электронная почта: michael.ivanov@tomo.nsc.ru

31.08.2021

Согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Подпись *Иванова М.И.*
заверяю.
Ученый секретарь МТЦ СО РАН
Л.В. Яньшин к.х.н. Л.В. Яньшин
31.08.2021

