

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 003.014.02 (24.1.150.01 с 03 июня 2021г.) НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ИНСТИТУТА ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ И ГОРЕНИЯ ИМ. В. В. ВОЕВОДСКОГО СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЁНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 15.09.2021, № 5

О присуждении Художиткову Александру Эдуардовичу, гражданину Российской Федерации, учёной степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация *«Исследование молекулярной подвижности углеводов в микропористых металл-органических каркасах методом ^2H ЯМР спектроскопии»* в виде рукописи по специальности 01.04.17 – «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» принята к защите 26 мая 2021 г., протокол № 4, диссертационным советом Д 003.014.02 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук (ИХКГ СО РАН), Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 630090, г. Новосибирск, ул. Институтская, д. 3, приказ о создании диссертационного совета № 1511/нк-от 25.11.2016 года.

Соискатель, *Художитков Александр Эдуардович*, 1993 года рождения, на момент защиты диссертации работает в должности младшего научного сотрудника Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федеральный исследовательский центр Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук (ИК СО РАН). В 2021 году соискатель окончил аспирантуру Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет». С 2014 года А.Э. Художитков работает в ИК СО РАН.

Диссертация выполнена в отделе физико-химических методов исследования ИК СО РАН.

Научный руководитель – кандидат физико-математических наук, **Колоколов Даниил Игоревич**, старший научный сотрудник отдела физико-химических методов исследования ИК СО РАН.

Официальные оппоненты:

1. **Кустов Леонид Модестович**, доктор химических наук, профессор, заведующий лабораторией разработки и исследования полифункциональных катализаторов, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук (ИОХ РАН);

2. **Марьясов Александр Георгиевич**, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории магнитной радиоспектроскопии, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук (НИОХ РАН);

дали **положительные отзывы** на диссертацию.

Ведущая организация, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук (ИНХ СО РАН), в своём **положительном заключении**, подписанном доктором химических наук, главным научным сотрудником лаборатории химии полиядерных металл-органических соединений **Бабайловым Сергеем Павловичем**, утверждённом заместителем директора по научной работе, доктором химических наук, профессором РАН **Дыбцевым Дániлом Николаевичем**, указала, что данная диссертационная работа удовлетворяет требованиям п. 9 Положения «О порядке присуждения учёных степеней», утверждённом Постановлением правительства РФ от 24.09.2013 № 842, а её автор, Художитков А.Э., заслуживает присвоения ему искомой учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

В положительном заключении ведущей организации имеются следующие замечания:

(1) об отсутствии объяснения причины, по которой взяты различные концентрации гостевых молекул в ZIF-8;

(2) об отсутствии упоминания ошибки определения активационных барьеров и предэкспоненциальных множителей;

(3) о лишних символах градуса возле прочерков в таблице 8.

Кроме того, задан вопрос об оправданности заключения о том, что при анализе релаксации линейных алканов считается, что сигнал получен от метильной группы.

Соискатель имеет 21 научную работу (из них 4 по теме диссертации), опубликованных в отечественных и международных рецензируемых научных изданиях, входящих в список ВАК. Шесть работ опубликованы в материалах всероссийских и международных конференций и симпозиумов. Личный вклад соискателя в опубликованные работы составляет примерно 80%.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. **Khudozhitkov A.E.**; Jobic H.; Freude D.; Haase J.; Kolokolov D.I.; Stepanov A.G. Ultraslow Dynamics of a Framework Linker in MIL-53 (Al) as a Sensor for Different Isomers of Xylene // Journal of Physical Chemistry C – 2016. V. 120. – P. 21704-21709.
2. **Khudozhitkov A.E.**; Arzumanov S.S.; Kolokolov D.I.; Stepanov A.G. Mobility of Aromatic Guests and Isobutane in ZIF-8 Metal–Organic Framework Studied by ^2H Solid State NMR Spectroscopy // Journal of Physical Chemistry C – 2019. V. 123. – P. 13765-13774.
3. **Khudozhitkov A.E.**; Arzumanov S.S.; Kolokolov D.I.; Stepanov A.G. Dynamics of xylene isomers in MIL-53 (Al) MOF probed by solid state ^2H NMR // Microporous Mesoporous Materials – 2020. V. 300. – P. 110155:1-10.
4. **Khudozhitkov A.E.**; Arzumanov S.S.; Kolokolov D.I.; Freude D.; Stepanov A.G. Dynamics of propene and propane in ZIF-8 probed by solid-state ^2H NMR // Physical Chemistry Chemical Physics – 2020. V. 22. – P. 5976-5984.

На автореферат диссертации поступило 4 отзыва. Все отзывы положительные с замечаниями. Отзывы поступили от:

кандидата физико-математических наук **Миличко Валентина Андреевича**, старшего научного сотрудника физического факультета Федерального

государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО»;

кандидата физико-математических наук *Толстого Петра Михайловича*, профессора кафедры физической химии Института химии Санкт-Петербургского государственного университета;

кандидата физико-математических наук *Иванова Михаила Юрьевича*, научного сотрудника лаборатории ЭПР спектроскопии Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт «Международный томографический центр» Сибирского отделения Российской академии наук;

кандидата химических наук *Сошников Игоря Евгеньевича*, научного сотрудника отдела механизмов каталитических реакций ИК СО РАН.

В отзывах на автореферат имеются следующие замечания об отсутствии: (1) изучения подвижности мета-ксилола в MIL-53 (Al) (*Миличко В.А.*); (2) объяснения, почему больший дипольный момент не приводит к более высокому барьеру для вращения 1-бутена по сравнению с н-бутаном (*Толстой П.М.*); (3) описания влияния дефектов и неоднородностей на подвижность гостевых молекул (*Миличко В.А.*); (4) комментария к возможности «сворачивания» алканов в клубок (*Сошников И.Е., Иванов М.Ю.*); кроме того, есть замечания стилистического и технического характера (*Толстой П.М., Иванов М.Ю.*).

В **положительных отзывах** оппонентов имеются следующие замечания и вопросы: *Кустов Л.М.* (1) усомнился в обоснованности предположения о том, что линейные алканы сворачиваются в клубок, и добавление дополнительных звеньев практически не меняет объем молекулы; (2) высказал предложение сравнить подвижность насыщенных и ненасыщенных углеводородов, а также линейных алканов с разной длиной цепи в MIL-53 (Al). Кроме того, была сделана пара замечаний технического и стилистического характера.

Марьясов А.Г. (1) указал на использование профессионального жаргона, а также на отсутствие объяснения всех использованных символов на Рис. 37б.

Во всех отзывах отдельно отмечается, что указанные замечания не снижают научной и практической значимости диссертационной работы. Все отзывы заканчиваются выводом, что диссертационная работа Художиткова А.Э. **полностью соответствует** требованиям, которые ВАК предъявляет к кандидатским

диссертациям, а её автор – Художитков А.Э. – заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается компетентностью оппонентов и сотрудников ведущей организации в области химии горения, что подтверждается наличием у них публикаций ряда научных работ в данной области исследований, в том числе соответствующих тематике диссертационного исследования соискателя и опубликованных в ведущих российских и международных журналах и изданиях.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- Впервые получены экспериментальные данные по молекулярной подвижности ксилолов, толуола, изобутана, н-пропана, н-бутана, н-октана, н-додекана, пропена, 1-бутена в ZIF-8, а также орто-ксилола и пара-ксилола в MIL-53 (Al). Оценены коэффициенты диффузии линейных алканов, пропена, 1-бутена и изобутана в ZIF-8.
- Показано, что активационный барьер диффузии линейных алканов в ZIF-8 немонотонно зависит от длины углеводородной цепи. Также обнаружена обратная зависимость барьера диффузии от кинетического диаметра в ряду пропан, н-бутан, изобутан.
- Установлено, что разделение смеси пропана и пропена на ZIF-8 становится возможным за счет большого различия в коэффициентах диффузии данных молекул, то есть реализуется кинетический механизм разделения.
- Продемонстрировано, что в случае пара-ксилола, адсорбированного в MIL-53 (Al), взаимодействие между гостевыми молекулами более сильное, а взаимодействие с каркасом более слабое по сравнению с орто-ксилолом. Полученные данные позволяют экспериментально подтвердить, что разделение пара-ксилола и орто-ксилола на MIL-53 (Al) происходит по термодинамическому механизму, то есть за счет различия в силе взаимодействия между гостевой молекулой и стенками каркаса.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

- Полученные в рамках данной диссертационной работы данные позволили детально описать подвижность гостевых молекул в металл-органических каркасах.
- Предложенный механизм молекулярной подвижности проливает свет на механизм диффузии гостевых молекул в металл-органическом каркасе ZIF-8, чей кинетический диаметр значительно превосходит размер окон между полостями.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики заключается в том, что показана возможность кинетического разделения смесей пропан/пропен и пропан/н-бутан с помощью ZIF-8. Сделаны оценки величины коэффициента диффузии и определены активационные барьеры диффузии для линейных алканов, пропена, 1-бутена в ZIF-8, что может помочь при выборе оптимальной температуры для разделения и предсказании селективности разделения.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что: *сделанные выводы и полученные научные результаты* основаны на применении экспериментальных методов и теоретических подходов, адекватных поставленной задаче; *проведены* тщательные экспериментальные измерения с проверенной воспроизводимостью результатов и проведено сопоставление полученных результатов с известной совокупностью экспериментальных данных.

Личный вклад соискателя состоит в сборе и анализе литературных сведений по теме диссертации; подготовке и проведении всей экспериментальной работы, а также выполнении всех численных расчётов и оценок. Соискатель принимал непосредственное участие в постановке научных задач, решаемых в данной диссертационной работе, разработке плана исследований, анализе и обсуждении полученных результатов исследований, формулировке выводов. Подготовка публикаций по теме диссертации осуществлялась совместно с соавторами работ и научным руководителем.

Диссертация выполнена на высоком научном уровне и представляет собой законченное исследование с актуальными задачами и содержательными, фундаментальными и практически важными результатами. Материалы диссертации соответствуют требованиям специальности 01.04.17 «химическая физика, горение и

взрыв, физика экстремальных состояний вещества» (п. 1 "экспериментальные методы исследования химической структуры и динамики химических превращений», п. 3 «молекулярная динамика, межмолекулярные потенциалы и молекулярная организация веществ»).

В ходе защиты диссертации критических замечаний из аудитории высказано не было. Соискатель Художитков А.Э. успешно ответил на все задаваемые ему в ходе заседания вопросы, на замечания оппонентов, ведущей организации и в отзывах на автореферат. Соискатель согласился со всеми техническими замечаниями и пожеланиями, по научным вопросам были даны аргументированные, развернутые и обоснованные ответы.

На заседании *15 сентября 2021 г.* диссертационный совет постановил: за решение научной задачи, связанной с определением механизмов подвижности и разделения ряда важных гостевых молекул в металл-органических каркасах, присудить *Художиткову Александру Эдуардовичу* учёную степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 11 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании и голосовании, из 24 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение учёной степени - 18, против присуждения учёной степени - 0, недействительных бюллетеней - 0.

Заместитель председателя диссертационного совета,

д-р физ.-мат. наук, профессор

 Дзюба Сергей Андреевич

Ученый секретарь диссертационного совета,

канд. хим. наук

 Поздняков Иван Павлович

«16» сентября 2021 г.