

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета на диссертацию

Подурец Анастасии Александровны

«Взаимосвязь «условия синтеза - морфологические и структурные параметры - фотокаталитические свойства» в допированных ионами 3d-элементов наночастицах диоксида олова»,

представленную на соискание учёной степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.1. Неорганическая химия.

Разработка современных методов очистки сточных вод является актуальной проблемой, экономически выгодным решением которой может стать использование фотокатализа под действием видимого света. Такой подход может быть реализован с использованием допированных наночастиц широкозонных оксидных полупроводников, позволяющих сместить диапазон действия фотокатализатора в длинноволновую область. Примером таких материалов являются наночастицы диоксида олова (SnO_2), допированные 3d-ионами переходных металлов, таких как никель, медь и кобальт. Поэтому их комплексное исследование, которое является темой настоящей диссертации, представляется актуальным и, несомненно, сыграет важную роль в понимании взаимосвязи между условиями синтеза наночастиц с их морфологией, структурой и фотокаталитическими свойствами, что откроет новые возможности для практических применений.

Диссертация изложена на 73 страницах и состоит из введения, трёх глав, заключения и двух приложений. Работа включает 11 рисунков и 4 таблицы. Список цитированной литературы содержит 140 источников.

Во введении изложена актуальность работы, сформулированы цель и задачи работы, обоснованы научная новизна работы, её теоретическая и практическая значимость, приведена методология и методы исследования, сформулированы научные положения диссертации, выносимые на защиту, а также приведены основные полученные результаты. Помимо этого, во введении кратко изложены структура и объём работы, приведён список конференций и публикаций, в которых докладывались и были опубликованы полученные результаты, указан личный вклад автора, а также связь работы с научными проектами.

Главе 1 посвящена обзор литературы. В ней рассмотрены природа и механизм фотокатализа, проведено обсуждение фотокаталитических свойств диоксида олова, рассмотрены некоторые открытые вопросы фотокатализа, а также кратко обсуждаются синтез допированного диоксида олова и антибактериальные свойства наночастиц SnO_2 .

Глава 2 посвящена экспериментальной части работы. В ней описан синтез наночастиц Ni-SnO₂, Cu-SnO₂ и Co-SnO₂, а также рассмотрены использованные в работе экспериментальные и теоретические методы исследования, в том числе описаны методики изучения фотокаталитических и антибактериальных свойств, полученных наночастиц.

Глава 3 посвящена основным результатам работы. В разделе 3.1 рассматривается взаимосвязь между условиями синтеза и структурными параметрами наночастиц. В разделе 3.2 обсуждаются фотокаталитические свойства наночастиц в реакции разложения красителя метиленового синего. В разделе 3.3 рассматриваются антибактериальные свойства наночастиц серии Ni-SnO₂ под действием видимого света против E. coli.

В разделе «Заключение» обобщены полученные результаты и приведены основные выводы. В приложении А приведена информация (в таблицах 1 и 2) из литературных источников по фотокаталитическим свойствам чистых и допированных наночастиц SnO₂, а также по синтезу наночастиц SnO₂ допированных ионами Ni, Cu и Co. Также в приложении приведены 16 рисунков с экспериментальными и теоретическими результатами, происхождение которых не ясно. В приложении Б приведены 6 рисунков, которые также отображают экспериментальные и теоретические результаты, происхождение которых не ясно.

Замечания по диссертации следующие.

- 1) Во введении отсутствуют ссылки на литературные источники, что усложняет оценку актуальности работы и степень разработанности темы исследования.
- 2) В разделе 2.2 размер наночастиц недопированного диоксида олова указан без оценки ошибки и без оценки их распределения по размерам.
- 3) В разделе 2.3 «Спектроскопия комбинационного рассеяния» не указано учитывался ли, нагрев образца при измерении спектров комбинационного рассеяния, а также не обсуждается влияние длины волны возбуждения на спектр.
- 4) В разделе 2.3 «Квантово-химические расчеты» отсутствуют детали расчёта. В частности, не ясны критерии выбора функционала HSE06, не ясно какие параметры и приближения программы CASTEP использовались при расчёте, а также в чём суть использованного оригинального подхода.
- 5) В разделах 2.4 и 2.5 также отсутствуют детали расчёта взаимодействия поверхности наночастиц с молекулами метиленового синего и кислорода с использованием программы CASTEP.
- 6) В разделе 3.1.2 на странице 24 при интерпретации спектров рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) отсутствуют ссылки на литературные

источники, поэтому неясен вывод о степени окисления допантов. Ссылки также отсутствуют при интерпретации спектров РФЭС олова и кислорода.

- 7) В разделе 3.1.2 на странице 25 утверждается «Для недопированного SnO₂, полученного по такой же методике синтеза [50], наблюдался один хорошо разрешенный пик, соответствующий значению ширины запрещенной зоны 3.7 эВ, ...». Непонятно о каком пике идёт речь и соответственно каким образом определялась ширина запрещенной зоны. Экспериментальные данные для недопированного SnO₂ в работе отсутствуют.
- 8) В разделе 3.1.3 на странице 26 в подписи к таблице 1 отсутствуют пояснения к приведённым параметрам, что затрудняет её восприятие.
- 9) На рисунках зависимостей (рис. 4, 7, 8, 9, 10, 11) не приведены ошибки отображаемых величин.
- 10) Установленные с помощью квантово-химического расчета местоположения допантов в кристаллической структуре SnO₂ не подкреплены данными эксперимента.
- 11) Предложенная методика по использованию спектров комбинационного рассеяния для оценки количества дефектов в структуре наночастиц не подкреплена теоретической моделью.

Сделанные замечания не влияют на общую положительную оценку диссертационной работы А.А. Подурец и не снижают ценности полученных соискателем результатов.

Диссертация А.А. Подурец содержит **оригинальные** результаты, чья **достоверность** не вызывает сомнения. Материалы диссертации опубликованы в 5 научных статьях в международных рецензируемых журналах (Analyst (IF=5,227), Applied Surface Science (IF=7,392), Journal of Hazardous Materials (IF=14,224), Materials Chemistry and Physics (IF=4,778), Journal of Alloys and Compounds (IF=6,371)), индексируемых в базах данных РИНЦ, Web of Science и Scopus. В четырёх научных статьях из пяти автор диссертационной работы А.А. Подурец является первым автором.

В заключение, отмечу, что диссертация Подурец Анастасии Александровны на тему: «Взаимосвязь «условия синтеза - морфологические и структурные параметры - фотокаталитические свойства» в допированных ионами Z^d-элементов наночастицах диоксида олова», соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 19.11.2021 № 11181/1 «О порядке присуждения учёных степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Подурец Анастасия Александровна

заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.1. Неорганическая химия. Нарушения пунктов 9 и 11 указанного Порядка в диссертации не обнаружены.

Член диссертационного совета

Доктор физики, ведущий научный сотрудник,
действительный член Латвийской академии наук,
заведующий лабораторией EXAFS спектроскопии
Института физики твёрдого тела Латвийского университета



Кузьмин Алексей Юрьевич
(Kuzmins Aleksejs).

31.03.2023