

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета на диссертацию Подурец Анастасии Александровны на тему: «Взаимосвязь «условия синтеза – морфологические и структурные параметры – фотокаталитические свойства» в допированных ионами 3d- элементов наночастицах диоксида олова», представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.1 – Неорганическая химия.

Актуальность проблемы загрязнения вод промышленными отходами и повторного использования сточных вод требует создания эффективных систем очистки, основанных на использовании видимого света, способных удалять органические загрязнители. Необходимость снижения эксплуатационных расходов на очистку сточных вод и достижения низкого энергопотребления водоочистных сооружений повышает интерес к высокоэффективным фотокатализаторам, работающим под действием видимого света. В связи с возросшим спросом на высокоэффективные фотокатализаторы внедрение широкозонных оксидных полупроводников по типу SnO_2 оказалось эффективным в большом числе фотокаталитических систем. Согласно литературным данным, допирование полупроводников оказалось успешным решением для увеличения фотокаталитического отклика в области видимого света. Для развития фотокатализаторов как для научных исследований, так и для промышленного применения, необходимо разработать алгоритм дешевого, эффективного и, что также очень важно, масштабируемого способа производства фотокатализаторов. В связи с этим диссертационная работа Подурец Анастасии Александровны, посвященная установлению взаимосвязи условий синтеза, морфологических и структурных параметров и фотокаталитических свойств в допированных ионами 3d- элементов наночастицах диоксида олова, которые также обладают антибактериальной активностью, является достаточно актуальной как с точки зрения фундаментальных, так и прикладных исследований.

В работе получена серия образцов наночастиц диоксида олова, допированных ионами никеля, меди и кобальта, диаметром 3 нм при различных рН и концентрациях допантов.

Фундаментальная научная новизна диссертации заключается в том, что для исследования наночастиц на основе допированного диоксида олова в отдельную группу выделяются морфологические параметры (форма, размер частиц и размер кристаллитов) и вводятся в рассмотрение структурные параметры (параметры элементарной ячейки, оценка количества дефектов, оценка количества кислородных вакансий, положение допанта в кристаллической структуре), которые в литературе практически не обсуждаются.

Несомненная **практическая новизна** диссертации заключается в разработке протокола изучения фотокаталитических свойств наночастиц на основе модельного красителя. Протокол представляет собой комплекс из 7 основных этапов, где помимо стандартного изучения кинетики адсорбции и фотокатализа, включены тесты на «улавливание», тесты на стабильность фотокатализаторов, изучение продуктов фотодеградации, а также впервые проводится оценка энергии взаимодействия молекулы загрязнителя с поверхностью фотокатализатора. Впервые введен в рассмотрение такой фактор, влияющий на фотокаталитическую активность, как соотношение количества кислородных вакансий к общему количеству дефектов. Установлено, что повышение количества кислородных вакансий с уменьшением числа общих дефектов приводит к значительному увеличению эффективности фотокатализа. Построены корреляционные зависимости, позволяющие предсказывать фотокаталитическую активность в зависимости от структурных параметров наночастиц.

В целях расширения функциональности нанокатализаторов также проведено изучение выживаемости бактерий *E.coli* под воздействием видимого света в присутствии фотокаталитических наночастиц. Полученные экспериментальные данные позволяют установить взаимосвязь между соотношением кислородных вакансий и дефектов с учетом

энергии взаимодействия поверхности наночастиц с молекулами кислорода и антибактериальной активностью синтезированных образцов.

Комбинирование практического и расчетного методов по изучению фотокаталитических свойств позволяет сформировать стратегию к предсказанию состава наноматериала в зависимости от решаемых задач по очистке вод.

Диссертация изложена в трех основных главах. В первой главе, в литературном обзоре, автор уделит внимание фотокаталитическим свойствам диоксида олова и перспективам его использования в области фотокатализа под воздействием источников видимого света. Особенно важным считаю краткое описание спорных с точки зрения материаловедения вопросов в области фотокаталитической очистки. Еще одним важным аспектом является обзор наиболее релевантных публикаций по теме фотокаталитической активности существующих материалов и синтеза допированных наночастиц. В экспериментальной части описаны используемые реактивы и процедура синтеза, приводятся методы исследования полученных образцов. В третьей главе, посвященной обсуждению результатов, приводится детальное описание экспериментальных данных и сравнительная оценка полученных серий образцов.

Хочется отметить качественность иллюстративных материалов, благодаря чему было легко ориентироваться в большом количестве полученных экспериментальных данных. Также хочется отметить высокую оценку работы научным сообществом, что подтверждается пятью публикациями в ведущих химических журналах издательств Elsevier и Royal Society of Chemistry, четыре из которых имеют рейтинг Q1. О **достоверности** полученных **результатов** и **обоснованности** сделанных **выводов** говорит апробация работы на 16 конференциях, где три доклада были признаны лучшими в номинации «устный доклад», а также участие в качестве основного исполнителя в гранте Российского фонда фундаментальных исследований №20-03-00762 А «Разработка подходов к компьютерному моделированию процессов роста наночастиц из растворов: теоретическое и экспериментальное исследование на примере диоксида олова – материала с фотокаталитической активностью» (2020 – 2022 гг.).

Личный вклад автора понятен и не вызывает сомнений. Сделанные выводы соответствуют поставленной цели, необходимые для ее реализации задачи полностью отражены в результатах работы.

Однако в диссертации остались недостаточно раскрыты следующие вопросы:

1. Полностью ли включается допант в структуру SnO_2 , остается ли окраска раствора после отделения частиц центрифугированием?
2. В какой части является оригинальным использованный автором подход к проведению квантово-химических расчетов?
3. Как автор представляет себе возможность практического использования полученных результатов и их внедрения в технологию очистки сточных вод?
4. В экспериментальной части автор приводит информацию об измерении удельной поверхности, но при этом в дальнейшем тексте только коротко указан интервал величин поверхности.

Приведенные выше вопросы и замечание не влияют на общую положительную оценку работы в целом. Диссертация А.А. Подурец представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, в которой получен большой объем значимых результатов, подтверждающих квалификацию, необходимую для присуждения ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация Подурец Анастасии Александровны на тему: «Взаимосвязь «условия синтеза — морфологические и структурные параметры — фотокаталитические свойства» в допированных ионами 3d-элементов наночастицах диоксида олова», соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 19.11.2021 № 11181/1 «О порядке

присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Подурец Анастасия Александровна заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.1 – Неорганическая химия. Пункты 9 и 11 указанного Порядка диссертантом не нарушены.

Член диссертационного совета
Профессор кафедры аналитической химии
Санкт-Петербургского государственного университета,
доктор химических наук
31.03.2023



А.В. Пенькова