

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета на диссертацию Колоколова Даниила Сергеевича на тему: «Управление комплексом параметров, задаваемых в ходе синтеза, и связанных с ними фотокаталитических характеристик наночастиц диоксида олова, допированных ионами редкоземельных элементов», представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.1 – Неорганическая химия.

Актуальность темы диссертационного исследования

Диссертационная работа Колоколова Даниила Сергеевича посвящена исследованию фотокаталитических и фотолюминесцентных характеристик синтезированных наночастиц диоксида олова различной формы, допированных ионами редкоземельных 4f-элементов. Актуальность темы объясняется возможностью использования допированных наночастиц диоксида олова в фотокатализе окисления и деградации циклических органических соединений под действием видимого света, что является дешевым, высокоэффективным и безвредным для окружающей среды методом очистки сточных вод. Эффективность фотокатализа в значительной степени определяется структурой, размерами и формой наночастиц, а также наличием дефектов и присутствием допантов, поэтому детальные исследования фотокаталитических и фотолюминесцентных свойств наночастиц в зависимости от их структуры и методов синтеза являются необходимыми для разработки практических методов очистки загрязненных вод.

Фундаментальная научная новизна

Научная новизна работы заключается в разработке методики синтеза наночастиц определенной формы, размера и с заданной концентрацией допанта, а так же характеристики фотокаталитических и фотолюминесцентных свойств полученных наночастиц. Разработанный подход, включающий использование компьютерного моделирования с использованием экспериментальных данных в качестве входных параметров и проиллюстрированный на примере диоксида олова, позволяет предсказывать свойства наночастиц, основываясь на параметрах их синтеза.

Практическая новизна

Практическая новизна работы заключается в разработке методики для быстрого и дешевого метода очистки сточных вод от циклических органических загрязнителей. Успешность метода продемонстрирована на возможности удаления путем фотокаталитического разложения красителя метиленового синего и для разложения промышленно значимого загрязнителя антибиотика окситетрациклина.

Достоверность полученных результатов

Достоверность полученных результатов основывается на детальном описании процесса синтеза с указанием всех значащих параметров, использовании широкого спектра экспериментальных методов характеристики наночастиц (диффрактометрия, рентгенофазовый анализ, ПЭМ, ИК- и УФ спектроскопия) и компьютерных кванто-

химических расчетов, и обсуждением всех полученных разными методиками результатов в сравнении с имеющимися в литературе данными.

Личный вклад автора

Личный вклад автора состоял в участии в постановке целей и задач исследования, проведении литературного обзора, планировании и проведении экспериментов и численных расчетов, интерпретировании и комплексном анализе полученных результатов, подготовке докладов по результатам научной работы и выступлениях на научных конференциях, написании научных статей.

Основные замечания и вопросы

- Обзор литературы (глава 1) содержит детальное описание имеющихся работ о синтезе SnO₂ наночастиц, их структурной, фотокаталитической и фотолюминисцентной характеристики. Однако существующие теоретические работы по этим наночастицам обсуждены слабо.

- Имеется неясность какой функционал использовался в квантохимических расчетах. На стр. 31 автор пишет что во все расчеты были выполнены с использованием функционала GGA-PBE, но ниже в пункте 2.5.2 говорится об использовании функционала HSE06 для расчета зонной структуры и некоторых других свойств. Хотелось бы услышать объяснение какой функционал использовался в каком расчете, а также почему именно такой функционал был выбран.

- При вычислении энергии взаимодействия иона или молекулы загрязняющего вещества с поверхностью наночастицы (стр. 38), как выбиралось положение иона или молекулы, использовалась ли "оптимизация геометрии"? Как могло повлиять на результат то что растворитель (вода) не учитывался в расчетах?

-Автор убедительно объясняет механизм ориентационного присоединения небольших наночастиц ("строительных блоков") с помощью расчетов взаимодействия их граней друг с другом. Интересно услышать мнение автора что останавливает этот процесс ориентационного присоединения, и тем самым определяет конечный размер образовавшихся наночастиц.

- Рисунки 47-49 показывают предполагаемые пути разложения метиленового синего в результате фотокаталитического процесса. Практически все промежуточные продукты по-прежнему являются гетероциклами с чуть-чуть меньшей массой, и конечный путь до CO₂+H₂O не просматривается. Не может ли оказаться что процесс деградации закончится на каком-то более стабильном, но по-прежнему опасном или токсичном соединении?

Вышеприведенные замечания никоим образом не уменьшают значение работы, а являются вопросами для обсуждения и дальнейших исследований.

С учетом всего вышесказанного полагаю:

Содержание диссертации Колоколова Даниила Сергеевича на тему: «Управление комплексом параметров, задаваемых в ходе синтеза, и связанных с ними фотокаталитических характеристик наночастиц диоксида олова, допированных ионами редкоземельных элементов» соответствует специальности 1.4.1 – Неорганическая химия.

Диссертация является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение научной задачи, имеющей значение для развития соответствующей отрасли знаний.

Нарушений пунктов 9, 11 Порядка присуждения Санкт-Петербургским государственным университетом ученой степени кандидата наук, ученой степени доктора наук соискателем ученой степени мною не установлено.

Диссертация соответствует критериям, которым должны отвечать диссертации на соискание ученой степени кандидата наук, установленным приказом от 19.11.2021 № 11181/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете» и рекомендована к защите в СПбГУ.

Член диссертационного совета

Кандидат физ.-мет наук, проффосор, Стокгольмский университет

Любарцев Александр Павлович

/электронная подпись/

14 января 2025 года

Signature page

This document has been electronically signed
using eduSign.

eduSign