

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.086.01, СОЗДАННОГО НА БАЗЕ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ
ИНСТИТУТ НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ ИМ. А.В. НИКОЛАЕВА СИБИРСКОГО
ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК, МИНОБРНАУКИ РОССИИ, ПО
ДИССЕРТАЦИИ ВЕГНЕР МАРГАРИТЫ ВЛАДИМИРОВНЫ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ
СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 23 октября 2024 года № 19

О присуждении Вегнер Маргарите Владимировне, гражданке Российской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Октаэдрические иодидные кластерные комплексы молибдена с H_2O и ОН-лигандами: синтез, изучение оптических свойств и получение фотокаталитических систем на их основе» по специальности 1.4.1. Неорганическая химия принята к защите 19.06.2024 г. (протокол заседания № 12) диссертационным советом 24.1.086.01, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук (ИНХ СО РАН), Минобрнауки России, 630090, г. Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, д. 3, действующего на основании приказа Минобрнауки РФ от 11.04.2012 г. № 105/нк.

Соискатель Вегнер (Марчук) Маргарита Владимировна, 19 января 1996 года рождения, в 2019 году окончила Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет» по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия. В период подготовки диссертации с октября 2019 г. по октябрь 2023 г. Вегнер (Марчук) Маргарита Владимировна обучалась в очной аспирантуре ФГБУН Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук, г. Новосибирск, с августа 2020 г. по настоящее время работает младшим научным сотрудником в Лаборатории биоактивных неорганических соединений ИНХ СО РАН.

Диссертация выполнена в Лаборатории биоактивных неорганических соединений ИНХ СО РАН, Минобрнауки РФ.

Научный руководитель – кандидат химических наук Воротников Юрий Андреевич, старший научный сотрудник Лаборатории биоактивных неорганических соединений ИНХ СО РАН.

Официальные оппоненты:

Козлова Екатерина Александровна, доктор химических наук, профессор РАН, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН», г. Новосибирск, ведущий научный сотрудник Отдела гетерогенного катализа;

Кисель Кристина Станиславовна, кандидат химических наук, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет», ассистент, старший научный сотрудник Кафедры общей и неорганической химии дали **положительные** отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии твердого тела и механохимии Сибирского отделения Российской академии наук, г. Новосибирск, в своем **положительном** отзыве, подписанном директором института, доктором химических наук, членом-корреспондентом РАН Немудрым Александром Петровичем, подготовленном доктором химических наук, главным научным сотрудником, заведующим Лабораторией ионики твердого тела Уваровым Николаем Фавстовичем, указала, что диссертационная работа Вегнер Маргариты Владимировны «Октаэдрические иодидные кластерные комплексы молибдена с H_2O и ОН-лигандами: синтез, изучение оптических свойств и получение фотокаталитических систем на их основе» является законченным научным исследованием и имеет важное научное и практическое значение. По новизне и актуальности полученных результатов, а также теоретической и практической значимости представленная диссертационная работа удовлетворяет критериям, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата химических наук в соответствии с пунктами 9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 в действующей редакции, а ее автор, Вегнер Маргарита Владимировна, достойна присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.1. Неорганическая химия. Отзыв рассмотрен и утвержден на семинаре Института химии твердого тела и механохимии СО РАН, протокол № 2024-006 от 03.10.2024 г.

Соискатель имеет 13 опубликованных работ, в том числе 12 работ по теме диссертации, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 4 статьи. Все журналы входят в Перечень изданий, рекомендованных ВАК РФ для публикации результатов диссертационных исследований, и индексируются базами данных Web of Science и Scopus. Общий объем опубликованных по теме диссертации работ составляет 43 стр. (5,4 печ. л.), личный вклад автора – 3,8 печ. л. Недостоверные сведения о работах, опубликованных автором диссертации, отсутствуют.

Наиболее значимые работы по теме диссертации:

1. Ivanova M.N., Vorotnikov Y.A., Plotnikova E.E., **Marchuk (Vegner) M.V.**, Ivanov A.A., Asanov I.P., Tsygankova A.R., Grayfer E.D., Fedorov V.E., Shestopalov M.A. Hexamolybdenum

clusters supported on exfoliated h-BN nanosheets for photocatalytic water purification // Inorg. Chem. 2020. – V. 59, No. 9. P. 6439-6448.

2. **Marchuk (Vegner) M.V.**, Vorotnikova N.A., Vorotnikov Y.A., Kuratieva N.V., Stass D.V., Shestopalov M.A. Optical properties regularities in the family of $\{Mo_6I_8\}$ aquahydroxo complexes // Dalton Trans. 2021. – V. 50, No. 25. P. 8794-8802.

3. **Marchuk (Vegner) M.V.**, Asanov I.P., Panafidin M.A., Vorotnikov Y.A., Shestopalov M.A. Nano TiO_2 and molybdenum/tungsten iodide octahedral clusters: synergism in UV/visible-light driven degradation of organic pollutants // Nanomaterials 2022. – V. 12, No. 23. 4282.

4. **Marchuk (Vegner) M.V.**, Vorotnikov Y.A., Kuratieva N.V., Shestopalov M.A., Cationic cluster complex $[\{Mo_6I_8\}(H_2O)_4(OH)_2]^{2+}$ with diphenyl phosphate anions: structure and optical properties behavior // Inorg. Chim. Acta - 2024. – V. 560, 121819.

На диссертацию и автореферат диссертации поступило **четыре** отзыва. Все отзывы положительные, три содержат замечания. Отзывы поступили от:

1. **Прима Дарьи Олеговны**, к.х.н., старшего научного сотрудника Лаборатории № 33, ФГБУН Институт органической химии им. Зелинского РАН, г. Москва. Отзыв содержит вопросы: «1) Какую роль играют гидрофильные OH-группы на поверхности BNNS в контексте взаимодействия с кластерным комплексом и последующего фотокатализа? 2) Чем обусловлено резкое снижение молибдена в образцах при $n=5$, и как это связано с процессом гидролиза и концентрацией свободного иона NO_3^- в растворе?».

2. **Лысикова Антона Игоревича**, к.х.н., старшего научного сотрудника Отдела нетрадиционных каталитических процессов, ФГБУН «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН», г. Новосибирск. Отзыв содержит замечание: «Стоит приводить более детальную расшифровку используемых сокращений, которые приводятся в работе».

3. **Давыдовой Анны Сергеевны**, к.х.н., научного сотрудника Лаборатории химии РНК ФГБУН Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН, г. Новосибирск. Отзыв содержит вопрос: «Проводилось ли сравнение фотокаталитической активности полученных в рамках данной работы материалов с традиционно используемыми фотокатализаторами в области очистки от органических загрязнений?».

4. **Кинжалова Михаила Андреевича**, д.х.н., доцента, доцента Кафедры физической органической химии ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный университет». Отзыв без замечаний.

Все отзывы заканчиваются выводом, что диссертационная работа Вегнер Маргариты Владимировны **полностью соответствует** требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.1. Неорганическая химия.

Выбор *ведущей организации* обосновывается ее лидирующей позицией в области теоретического и экспериментального исследования функциональных свойств разных материалов, в том числе эффективных люминофоров. Выбор в качестве официального оппонента *д.х.н., профессора РАН Козловой Екатерины Александровны* обусловлен ее большим опытом работы и высокой квалификацией в области гетерогенного фотокатализа. Выбор в качестве официального оппонента *к.х.н. Кисель Кристины Станиславовны* обосновывается ее опытом в области исследования люминесцентных соединений.

Диссертационный совет отмечает, что в результате выполненных соискателем исследований:

разработаны методы синтеза восьми кластерных комплексов $\{Mo_6I_8\}$ с H_2O и OH^- лигандами;

показано, что на оптическое поглощение кластеров влияет только лигандное окружение: оно уменьшается при координации большего количества молекул воды;

продемонстрирован многокомпонентный характер люминесценции кластерных комплексов; **определено**, что тип лиганда и расстояние между кластерными фрагментами в структуре комплексов влияют только на первые две компоненты, расположенные в коротковолновой (высокоэнергетической) части спектра люминесценции, в то время как две другие (низкоэнергетические) компоненты остаются практически неизменными;

установлено, что уменьшение расстояния между кластерными фрагментами в структуре комплексов, а также координация большего количества молекул воды приводит к увеличению вклада высокоэнергетических компонент спектра люминесценции, и, как следствие, к гипсохромному сдвигу максимума эмиссии и общему увеличению интенсивности эмиссии, времени жизни и квантового выхода люминесценции;

изучены фотокаталитические свойства материалов на основе нитрида бора в реакции разложения красителя родамина Б, откуда было **выявлено**, что наибольшую скорость разложения красителя родамина Б при УФ-облучении имеет образец с наибольшим содержанием кластерного комплекса (эффективная константа скорости равна $0,06 \text{ мин}^{-1}$), в то время как для TiO_2 -материалов эффективные константы скорости реакции равны $\sim 0,1 \text{ мин}^{-1}$, как при УФ-, так и при солнечном облучении;

установлено, что основные фотоактивные центры в материале на основе модифицированного нитрида бора располагаются на поверхности в виде пленки аквагидроксикомплекса, в то время как матрица способствует наиболее эффективному разделению электрон-дырочной пары;

для материала на основе диоксида титана **показано**, что в фотокаталитическом процессе принимают участие все активные частицы: $OH^\bullet$, $O_2^{\bullet-}$, e^- или h^+ , причем вклад $O_2^{\bullet-}$ преобладает.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

выведены закономерности изменения поглощения и люминесценции от расстояния между кластерными фрагментами в структуре комплексов и типа внешних лигандов в ряде кластерных комплексов;

предложен механизм фотокаталитического окисления родамина Б в присутствии материалов на основе TiO_2 .

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

полученные зависимости оптических свойств от типа лиганда и кристаллической структуры кластерных комплексов могут **послужить основой** для предсказания оптических свойств родственных систем;

продемонстрирован потенциал применения октаэдрических кластерных комплексов в качестве фотокатализаторов, поскольку разработанные материалы на их основе проявили свою эффективность в реакциях фотокаталитического разложения красителя родамина Б.

Оценка достоверности результатов исследования выявила высокий экспериментальный уровень работы. Достоверность представленных результатов основывается на высоком методическом уровне проведения работы, согласованности экспериментальных данных с данными других исследований. Корректность полученных результатов подтверждается их воспроизводимостью. Признание результатов работы мировым научным сообществом подтверждается наличием публикаций по результатам выполненной работы в рецензируемых журналах различного уровня.

Личный вклад соискателя заключается в проведении синтезов всех перечисленных в работе соединений и материалов, обработке результатов фотофизических и физико-химических исследований, выполнении экспериментов по фотокатализу, а также анализе литературных данных. Автор принимал участие в постановке цели и задач исследования, обсуждении результатов работы и формулировке выводов. Подготовка статей и тезисов докладов осуществлялась совместно с научным руководителем и соавторами работ.

В ходе защиты диссертации были высказаны следующие критические замечания: неясно, что подразумевается под понятием «плотность кристалла» при обсуждении ее влияния на фотофизические свойства кластерных комплексов; в докладе не представлено обоснования выбора типа перехода при определении ширины запрещенной зоны.

Соискатель Вегнер М.В. ответила на задаваемые в ходе заседания вопросы и пояснила, что под плотностью подразумевается кристаллографическая плотность, которая также связана с расстоянием между кластерными фрагментами в кристаллической структуре – чем меньше расстояние, тем выше плотность; непрямой тип перехода был предположен на основе анализа большой выборки литературных данных по материалам на основе диоксида титана.

На заседании 23 сентября 2024 г., протокол № 19, диссертационный совет принял решение за проведенное исследование, посвященное синтезу октаэдрических иодидных кластерных комплексов молибдена с H_2O и OH^- лигандами, изучению их оптических свойств и получению фотокаталитических систем на их основе, и вносящее значительный вклад в фундаментальные знания в области координационной химии, результаты которого могут быть использованы для создания новых эмиссионных материалов фотокатализаторов, присудить Вегнер Маргарите Владимировне ученую степень кандидата химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 23 (двадцати трех) человек, из них 9 (девять) докторов наук по специальности 1.4.1. Неорганическая химия, участвовавших в заседании, из 30 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение ученой степени – 23 (двадцать три), против – 0 (нет), недействительных бюллетеней – 0 (нет).

Председатель диссертационного совета

д.х.н., чл.-к. РАН

Федин Владимир Петрович

Ученый секретарь диссертационного совета

д.х.н., доцент

Потапов Андрей Сергеевич

23 октября 2024 г.

