

Отзыв на автореферат диссертации С.И. Беззубова

"Синтез, оптические и электрохимические свойства комплексов иридия (III) с 2-арилбензимидазолами", представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности (02.00.01 - неорганическая химия)

Автореферат диссертации С.И. Беззубова содержит результаты исследования оптических и окислительно-восстановительных свойств ряда комплексов иридия(III) с 2-арилбензимидазолами. Поставленные в работе задачи без сомнения актуальны, так как полученные комплексы демонстрируют интересные оптические свойства и могут быть использованы в качестве красителей в солнечных элементах (в виде ячеек Грэтцеля).

Диссертантом синтезировано 13 новых разнолигандных циклометаллированных комплексов иридия(III) с производными 2-арилбензимидазола в качестве донорных лигандов и производными 2,2'-бипиридина и 1,10-фенантролина в качестве "якорных" лигандов, необходимых для связывания комплекса с поверхностью оксидного полупроводника. Полученные комплексы надежно охарактеризованы комплексом современных физико-химических методов.

В работе с применением квантово-химических расчетов и ряда экспериментальных методов установлены закономерности влияния природы лигандов на оптические и окислительно-восстановительные свойства комплексов иридия(III). Наибольшей удачей соискателя является нахождение возможности синтеза циклометаллированных комплексов иридия(III) из полиядерного ацетата иридия $[\text{Ir}_3^{\text{III,III,IV}}(\mu_3\text{-O})(\text{CH}_3\text{COO})_6(\text{H}_2\text{O})_3](\text{CH}_3\text{COO})_2$ с C^N лигандом в присутствии LiCl. Методом РСА определена кристаллическая структура комплекса иридия(III) с 6 1-фенил-2-(3,4-диметокси-фенил)бензимидазолом и 2,2'-бипиридил-4,4'-дикарбоновой кислотой. О высоком качестве этой части работы говорит тот факт, что она была депонирована в Кембриджском структурном банке (CCDC 974801).

К автореферату имеются замечания.

Недостаточно обоснован выбор функционала и базисных наборов для квантово-химического моделирования в рамках DFT. Несмотря на то, что значительная часть работы посвящена отработке методик получения циклометаллированных комплексов иридия(III), в автореферате по неясным для рецензента причинам не были отражены особенности синтеза циклометаллированных комплексов

иридия(III), не указаны достигнутые соискателем выходы целевых соединений и не проведены их сопоставления, например, в спектральном ряду усиления электрон-донорных свойств C^N лигандов. Очень фрагментарно подана электрохимическая часть работы, посвященная описанию энергетической диаграммы и установления пригодности полученных КС для фотосенсибилизации диоксида титана в ячейках Грэтцеля. Рецензент выражает надежду, что ответы на его вопросы и замечания прозвучат при защите диссертации.

Приведенные замечания, однако, не снижают общей положительной оценки диссертации. Выполненная С.И. Беззубовым работа по своей новизне, актуальности и значимости полученных результатов, обоснованности и достоверности выводов полностью соответствует всем требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, в том числе критериям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г №842, и является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задачи, имеющей значение для развития неорганической и координационной химии, а ее автор Станислав Игоревич Беззубов, безусловно, заслуживает присуждения ему искомой ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.01 – неорганическая химия.

Отзыв на автореферат рассмотрен и утвержден на семинаре лаборатории химии углеродных материалов ИНХ СО РАН от 04 декабря 2014 г. с привлечением всех необходимых специалистов по профилю рассматриваемой диссертации.

Федеральный эксперт ФГБНУ НИИ РИНКЦЭ
свидетельство о регистрации в Федеральном реестре
экспертов научно-технической сферы № 04-02194,
Ведущий научный сотрудник лаборатории
химии углеродных материалов
Института неорганической химии
им. А.В. Николаева (ИНХ СО РАН),
доктор технических наук

Валентин Николаевич Митькин

г. Новосибирск, 30.04.2014

630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 3, <http://niic.nsc.ru>, тел. 8 383 330 8568

