

Отзыв

на автореферат диссертации Головешкина Александра Сергеевича «Слоистые соединения дисульфида молибдена с азотсодержащими органическими молекулами: строение и электрокаталитические свойства», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Диссертационная работа Головешкина А. С. посвящена изучению особенностей строения слоистых соединений дисульфида молибдена с органическими азотсодержащими молекулами. Сложность выполнения настоящей работы заключается в том, что качество кристаллов является недостаточным как для монокристалльного, так и порошкового рентгенодифракционных методов. Поэтому разработка новых методов и подходов для структурного анализа этих соединений является ключевым моментом настоящей работы. В свою очередь, интерес к объектам такого рода обусловлен уникальными физико-химическими свойствами наноразмерных моно- и малослойных частиц дисульфида молибдена, в том числе заряд-транспортными и каталитическими. Все это определяет *актуальность* настоящего исследования.

Моделирование дифрактограмм исследованных соединений основано на подходе, предложенном К. Уфером с коллегами для фазового анализа дифрактограмм турбостратно-разупорядоченных глин. Данный подход позволяет производить ритвельдовское уточнение дифракционных картин с использованием сверхъячейки. Автором работы, на основе вышеотмеченного подхода, проведено моделирование слоев дисульфида молибдена, которое показало, что октаэдрическая координация атома молибдена лучше описывает экспериментальные дифрактограммы. Для учета корреляций, возникающих из-за наличия предпочтительного расположения слоев MoS_2 , модель Уфера была модернизирована, что позволило достоверно описать пики, которые не описываются в однослойном варианте. На основе расшифрованных структур, автор исследования провел квантовохимические расчеты и оценил энергию невалентных взаимодействий органических молекул со слоями MoS_2 и энергию когезии между слоями. Анализ РЭП в изученных структурах показал, что наиболее распространенными связывающими взаимодействиями между органическими молекулами и MoS_2 являются слабые $\text{CH}\cdots\text{S}$ контакты, которые за счет их большого количества могут иметь достаточно высокую суммарную энергию. Отдельно, необходимо отметить изучение диссертантом электрокаталитической активности полученных материалов в реакции выделения водорода. В этой части диссертационной работы показано, что слоистые системы, содержащие органические молекулы являются потенциально интересными объектами для

выделения водорода из воды.

По результатам диссертационной работы опубликовано достаточное число печатных работ (8 статей и 10 тезисов докладов) в изданиях по перечню ВАК, а также в международных базах цитируемости Scopus и Web of Science.

Замечания по существу отсутствуют. Проведенные исследования по своей актуальности, научной новизне, объему и практической значимости полученных результатов соответствуют критериям пп. 9-14 "Положения о порядке присуждения учёных степеней" утвержденного Постановлением № 842 Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года (с изменениями постановления Правительства Российской Федерации от 21 апреля 2016 г. № 335 "О внесении изменений в Положение о присуждении ученых степеней"), а автор диссертации Головешкин А. С. несомненно достоин присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 - "Физическая химия".

Фукин Георгий Константинович,
доктор химических наук (02.00.04), профессор РАН

Руководитель сектора рентгенодифракционных исследований ИМХ РАН

Адрес организации: 603950, Нижний Новгород, бокс 445, ул. Тропинина 49,

тел. +7 (831)462-7709

Подпись Фукина Г.К. заверяю
Начальник ОК ИМХ РАН Муравьева Е.В.

28 апреля 2021

