

УТВЕРЖДАЮ  
Директор ИНЭОС РАН  
Чл.-корр. РАН д.х.н. А.А. Трифонов  
«16» марта 2021г.



## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки  
Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова  
Российской академии наук (ИНЭОС РАН)

Диссертационная работа «Слоистые соединения дисульфида молибдена с азотсодержащими органическими молекулами: строение и электрокаталитические свойства» выполнена в лаборатории рентгеноструктурных исследований ИНЭОС РАН. В период подготовки диссертации Головешкин Александр Сергеевич обучался в очной аспирантуре (2016-2020 гг.) Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук (ИНЭОС РАН) и работал в лаборатории рентгеноструктурных исследований в должности старшего лаборанта (2012-2016 гг.), инженера-исследователя (2016-2018 гг.), в настоящее время работает в должности младшего научного сотрудника в той же лаборатории.

В 2016 году А.С. Головешкин окончил ВХК РАН при РХТУ им. Д.И. Менделеева по специальности «Фундаментальная и прикладная химия» с присвоением квалификации «Специалист».

Удостоверение о сдаче кандидатских экзаменов выдано в 2021 г. Федеральным государственным бюджетным учреждением науки Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук.

**Научный руководитель:** Голубь Александр Семёнович, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт

элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук, кандидат химических наук, старший научный сотрудник.

**В ходе обсуждения диссертанту были заданы следующие вопросы:**

- д.х.н. Корлюков А.А.: Чем обусловлена высокая энергия когезии в слоистом соединении дисульфида молибдена с протонированными молекулами 1,8-бис-(диметиламино)нафталина?
- д.х.н. Лысенко К.А.: Как соотносятся суммарные энергии невалентных взаимодействий, выявленных в рамках теории Бейдера «Атомы в молекулах», и энергии когезии, рассчитанные с использованием расслоенных моделей?
- к.х.н. Дмитриенко А.О.: Для каких других слоистых систем может быть применен предложенный подход к моделированию дифрактограмм?
- к.х.н. Федянин И.В.: Чем обусловлен выбор функционала RBE при проведении квантовохимических расчетов?
- к.х.н. Ананьев И.В.: Рассматривалось ли наличие динамического разупорядочения в структуре слоистого соединения дисульфида молибдена с катионами 1-бутил-3-метил-имидазолия?
- к.х.н. Смольяков А.Ф.: Как учитывалось сопротивление ячейки при проведении электрохимических измерений?

**По итогам заседания коллоквиума принято следующее решение:**

Диссертационная работа Головешкина Александра Сергеевича затрагивает актуальную проблему в области физической химии, направлена на изучение возможности стабилизации проводящей модификации дисульфида молибдена в гетерослоистых соединениях  $\text{MoS}_2$  с азотсодержащими органическими молекулами. Работа выполнена на высоком профессиональном уровне, интерпретация полученных результатов не вызывает возражений, автором работы четко и обоснованно сформулированы выводы, их достоверность не вызывает сомнений.

**Личный вклад автора** состоит в непосредственном участии во всех этапах диссертационного исследования: постановке задач, анализе литературных данных, подготовке и проведении экспериментов, проведении



квантово-химических расчетов, интерпретации и обсуждении полученных данных, их обобщении, формулировке выводов работы и подготовке научных публикаций и докладов по теме исследования.

**Научная новизна и практическая значимость работы.** В работе получен ряд слоистых соединений дисульфида молибдена с органическими катионами, в том числе шесть неизвестных ранее соединений. Установлено, что все полученные соединения имеют турбостратное строение, исходя из этого, предложен новый подход к моделированию их порошковых дифрактограмм. Применение данного подхода позволило впервые установить атомную структуру десяти гетерослоистых соединений  $\text{MoS}_2$ . Разработанный подход может быть полезен при изучении других слоистых соединений.

С помощью квантовохимических расчетов впервые изучена структурообразующая роль невалентных взаимодействий  $\text{MoS}_2$  с органическими молекулами и оценены энергии этих взаимодействий. Предложен и апробирован способ расчета энергии когезии слоев гетерослоистого соединения  $\text{MoS}_2$ . Сопоставление соответствующих величин позволило объяснить закономерности сборки соединений, для которых возможно образование фаз различного строения. Этот способ может быть использован также для прогнозирования устойчивости соединений, планируемых к получению.

Выявлена высокая электрокаталитическая активность полученных соединений в реакции выделения водорода из воды. Установлено, что ряд катализаторов на основе гетерослоистых соединений  $\text{MoS}_2$  обладают повышенной устойчивостью к термовоздействию, значительно превосходя в этом катализаторы на основе метастабильной модификации  $\text{MoS}_2$  без органических гостей. Эти данные представляют интерес для разработки на основе таких соединений новых катализаторов с улучшенными характеристиками.

Основное содержание работы отражено в 18 публикациях, а именно: 8 — в научных журналах, рекомендованных ВАК, 10 — в тезисах сборников докладов научных конференций.

Диссертация «Слоистые соединения дисульфида молибдена с азотсодержащими органическими молекулами: строение и электрокаталитические свойства» Головешкина Александра Сергеевича полностью соответствует требованиям «Положения о присуждении ученых степеней» ВАК Минобрнауки России, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842 и приказом Минобрнауки России от 10 ноября 2017 года № 1093, предъявляемых к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 — Физическая химия. Заключение принято на заседании расширенного коллоквиума лаборатории Рентгеноструктурных исследований №201 с участием двух членов диссертационного совета Д002.250.01 от 15 марта 2021г.

**На заседании присутствовало 19 человек:** Академик РАН Еременко И.Л., д.х.н. Локшин Б.В. (член совета), д.х.н. Любимов С.Е. (член совета), д.х.н. Лысенко К.А., д.х.н. Корлюков А.А., д.х.н. Долгушин Ф.М., к.ф-м.н. Супоницкий К.Ю., к.х.н. Вологжанина А.В., к.х.н. Федянин И.В., к.х.н. Ананьев И.В., к.х.н. Смольяков А.Ф., к.х.н. Голубь А.С., к.х.н. Дмитриенко А.О., к.х.н. Антонов Д.Ю., к.х.н. Шаповалов А.В., н.с. Лененко Н.Д., м.н.с. Ушаков И.Е., м.н.с. Вододин А.Д., м.н.с. Карноухова В.А.

**Результаты голосования:** «за» — 19 чел., «против» — 0 чел., «воздержалось» — 0 чел.

Председатель коллоквиума

академик РАН Еременко И.Л.

Секретарь коллоквиума

к.х.н. Вологжанина А.В.

ПОДПИСЬ  
УДОСТОВЕРЯЮ  
ОТДЕЛ КАДРОВ ИНЭОС РАН

Отдел кадров

Специалист по кадрам

Скворцова В.Р.

Дата 15.03.2021г.