ЗАКЛЮЧЕНИЕ

комиссии диссертационного совета 24.1.086.01 на базе ИНХ СО РАН
по диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук
Загузиной Алены Андреевны «Наноструктурированные материалы на основе MoS_2 для анодов литий- и натрий-ионных аккумуляторов»
по специальности 1.4.4. Физическая химия

Комиссия диссертационного совета 24.1.086.01 на базе ФГБУН Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН в составе: председателя – доктора химических наук, профессора РАН **Басовой Тамары Валерьевны**, членов комиссии – доктора физико-математических наук **Козловой Светланы Геннадьевны**, доктора химических наук **Наумова Николая Геннадьевича** и в соответствии с п. 31 Положения о совете по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук, утвержденного приказом Минобрнауки России от 10 ноября 2017 г. № 1093 (в ред. от 14.12.2023 г.), на основании ознакомления с диссертацией на соискание ученой степени кандидата химических наук **Загузиной Алены Андреевны** и состоявшегося обсуждения приняла следующее заключение.

1. Соискатель ученой степени кандидата химических наук соответствует требованиям п.п. 2-4 Положения о присуждении ученых степеней (утв. Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.02.2013 г. № 842 в ред. от 16.10.2024 г.), необходимым для допуска его диссертации к защите.
2. Диссертация на тему «Наноструктурированные материалы на основе MoS_2 для анодов литий- и натрий-ионных аккумуляторов» в полной мере соответствует паспорту специальности 1.4.4. Физическая химия, к защите по которой представлена работа.
3. Основные положения и выводы диссертационного исследования отражены в 5 статьях, опубликованных **Загузиной Аленой Андреевной** в международных журналах, входящих в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, или индексируемых в международных информационно-библиографических системах *Web of Science* и *Scopus*, а также в тезисах 16 докладов на российских и международных научных конференциях. Представленные соискателем сведения об опубликованных им работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации, достоверны.
4. Оригинальность текста диссертации составляет не менее 90 % от общего объема текста; цитирование оформлено корректно по всему тексту; заимствованного материала, использованного в диссертации без ссылки на автора либо источник заимствования, не обнаружено; научных работ, выполненных соискателем ученой степени в соавторстве, но без ссылок на соавторов, не выявлено. Текст диссертации, представленной в диссертационный совет, идентичен тексту диссертации, размещенному на официальном сайте ИНХ СО РАН.

5. Диссертационная работа посвящена получению наноструктурированных материалов на основе дисульфида молибдена (MoS_2) методом быстрого высокотемпературного термолиза аэрогелей из соединений прекурсоров. Такой подход позволяет получать неравновесные дефектные структуры с развитой поверхностью и управлять их свойствами за счет изменения температуры, газовой атмосферы и состава прекурсоров. Показано, что термолиз аэрогеля $(NH_4)_2MoS_4$ в инертной атмосфере аргона при температурах от 400 до 700 °C в течение 10–15 секунд приводит к образованию пористых микропластин, состоящих из искривленных и переплетенных нанослоев MoS_2. Повышение температуры синтеза способствует росту кристалличности и увеличению числа слоев в стопках, а удельная поверхность материала достигает значений, существенно превышающих для объемного MoS_2. С использованием комплекса физико-химических методов выявлены взаимосвязи между параметрами синтеза, структурой и составом получаемых материалов. Из полученных материалов были изготовлены электроды и исследованы электрохимические свойства в макетах литий-ионных аккумуляторов (ЛИА). Показано, что наноструктурированный MoS_2, синтезированный при 700 °C, обеспечивает высокую удельную емкость 1139 мАч·г$^{-1}$ при плотности тока 0,1 А·г$^{-1}$ и сохраняет стабильную работу в течение 70 циклов.

Показано, что проведение синтеза в атмосфере аммиака позволяет эффективно модифицировать электронную структуру дисульфида молибдена за счет внедрения атомов азота и образования серных вакансий. Комплексное влияние этих структурных дефектов способствует улучшению электрохимических свойств MoS_2 в ЛИА, что проявляется в повышении значений удельной емкости при интеркаляции Li^+ по сравнению с теоретической емкостью для немодифицированного MoS_2.

С целью улучшения стабильности электродного материала на основе MoS_2 и повышения его проводимости было предложено создание гибридных материалов MoS_2 с восстановленным оксидом графена (ВОГ). Исследовано влияние массового соотношения компонентов и температуры синтеза (400, 600 и 700 °C) на структуру и свойства гибридных материалов в ЛИА и натрий-ионных аккумуляторах (НИА). Методами РФЭС и спектроскопии характеристических потерь энергии электронов показано образование ковалентных связей между компонентами. Повышение температуры синтеза до 700 °C приводит к переходу от преимущественно параллельной ориентации слоев MoS_2 относительно графеновых листов к вертикальной. Гибридный материал, полученный при температуре 600 °C и с номинальным массовым соотношением компонент 3 к 1, является оптимальным для применения в ЛИА и НИА. Он демонстрирует высокую удельную емкость: до 1576 мАч·г$^{-1}$ в литиевых системах и до 583 мАч·г$^{-1}$ в натриевых при плотности тока 0,1 А·г$^{-1}$, что является одними из лучших значений среди представленных в литературе. Для изучения электронной структуры лучшего гибридного материала MoS_2/ВОГ при взаимодействии с ионами натрия сконструирована электрохимическая ячейка с

рентгенопрозрачным окном для XANES-исследований. Выполнены *in situ* измерения исходного образца и *operando* измерения в процессе первого разряда в НИА. Электронная структура и фазовый состав разряженного электрода были дополнительно изучены методами РФЭС и РФА. Показано, что взаимодействие MoS_2 с ионами натрия сопровождается равномерным перераспределением заряда на атомах серы и молибдена и приводит к образованию 1T фазы MoS_2. Сохранение исходной гексагональной фазы MoS_2 обусловлено стабилизирующим эффектом ковалентных связей с графеном. Установлено, что превращение интеркалированного натрием MoS_2 в металлический молибден в первом цикле не происходит. Это подтверждается отсутствием соответствующих линий в рентгеновских спектрах поглощения.

Комиссия рекомендует:

1. Принять к защите на диссертационном совете 24.1.086.01 на базе ИНХ СО РАН диссертацию на соискание ученой степени кандидата химических наук **Загузиной Аленой Андреевной** «Наноструктурированные материалы на основе MoS_2 для анодов литий- и натрий-ионных аккумуляторов».

2. Утвердить официальными оппонентами:

– **Уварова Николая Фавстовича**, доктора химических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии твердого тела и механохимии Сибирского отделения Российской академии науки», г. Новосибирск;

– **Голубя Александра Семеновича**, кандидата химических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова Российской академии наук», г. Москва.

3. Утвердить в качестве ведущей организации **Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук, г. Москва**.

____ д.х.н., профессор РАН Басова Тамара Валерьевна

____ д.ф.-м.н. Козлова Светлана Геннадьевна

____ д.х.н. Наумов Николай Геннадьевич

Подписи Басовой Т.В.
Козловой С.Г., Наумо
заверяю
и.о. ученого секретаря
ИНХ СО РАН
к.х.н. Филатов Е.Ю.

26.08.2026г.