

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.340.04,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
АВТОНОМНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО
ОБРАЗОВАНИЯ «НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
НИЖЕГОРОДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. Н.И.
ЛОБАЧЕВСКОГО», ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ
СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 23.12.2025 г., протокол заседания № 18

О присуждении Родину Евгению Анатольевичу, гражданину РФ, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Влияние состава и структуры поверхности углеродных и бор-нитридных нанотрубок на их электронные и эмиссионные свойства», **в виде рукописи**, по специальности 1.4.4 – Физическая химия (химические науки) принята к защите 07.10.2025 (протокол заседания № 10) диссертационным советом 24.2.340.04, созданным на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского», Российская Федерация, 603022, Нижегородская область, г. Нижний Новгород, проспект Гагарина, д. 23 (приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 428/нк от 26.05.2025).

Соискатель – Родин Евгений Анатольевич, 13 января 1994 года рождения. В 2016 году соискатель окончил бакалавриат химического отделения Института физики и химии федерального государственного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П.

Огарева» по направлению подготовки 04.03.02 «Химия, физика и механика материалов», диплом о высшем образовании № 101318 0370603.

В 2018 году с отличием окончил магистратуру химического отделения Института физики и химии федерального государственного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарева» по направлению подготовки 04.04.01 «Химия», диплом о высшем образовании № 101318 1012409.

В 2020 году соискатель поступил в очную аспирантуру федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского» по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки». В 2024 году окончил очную аспирантуру, диплом об окончании аспирантуры от 02.10.2024 № 105204 0057971.

В период подготовки диссертации работал на кафедре физической химии федерального государственного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарева», в должности преподавателя.

Диссертация выполнена на кафедре аналитической и медицинской химии химического факультета федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского».

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор Князев Александр Владимирович, заведующий кафедрой аналитической и медицинской химии химического факультета федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»

Официальные оппоненты:

1. **Кетков Сергей Юлиевич**, доктор химических наук, профессор, ведущий научный сотрудник, заведующий лабораторией строения металлоорганических и координационных соединений ФГБУН «Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева» РАН;

2. **Маслов Михаил Михайлович**, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой физики твердого тела и наносистем (№70) института лазерных и плазменных технологий ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

дали **положительные отзывы на диссертацию.**

Ведущая организация – федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева» в своем **положительном отзыве**, подписанном доктором химических наук, профессором кафедры технологии электрохимических производств и химии органических веществ образовательно-научного института физико-химических технологий и материаловедения федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева» Гринвальдом Иосифом Исаевичем, кандидатом технических наук, заведующим кафедрой технологии электрохимических производств и химии органических веществ образовательно-научного института физико-химических технологий и материаловедения федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева» Ивашкиным Евгением Геннадьевичем, утвержденном проректором по научной работе, профессором РАН, доктором физико-математических наук Куркиным Андреем Александровичем, указала, что диссертация Родина Евгения Анатольевича на тему «Влияние состава и структуры поверхности углеродных и бор-нитридных нанотрубок на их

электронные и эмиссионные свойства» соответствует паспорту специальности 1.4.4 – Физическая химия (химические науки) по следующим пунктам: 1. Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений, а также их спектральных характеристик. 10. Создание и разработка методов компьютерного моделирования строения и механизмов превращений химических соединений на основе представлений квантовой механики, различных топологических и статистических методов, включая методы машинного обучения, методов молекулярной механики и молекулярной динамики, а также подходов типа структура-свойства. 11. Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, реакционной способности и динамике превращений химических соединений, находящихся в различном окружении, в том числе в кластерах, клатратах, твердых и жидкокристаллических матрицах, в полостях конденсированных среды и белковом окружении. По актуальности, уровню проведенных исследований, научно-практической значимости, обоснованности выводов, достоверности и надежности результатов диссертационная работа Родина Евгения Анатольевича «Влияние состава и структуры поверхности углеродных и бор-нитридных нанотрубок на их электронные и эмиссионные свойства» полностью соответствует всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук по положению «О порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842 в действующей редакции, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Соискатель имеет 52 опубликованные работы, в том числе 40 работ по теме диссертации, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 8 работ.

Недостовверные сведения о списке трудов, об опубликованных соискателем ученой степени работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации, в диссертации Родина Е.А. отсутствуют.

Наиболее значимые работы по теме диссертации:

Статьи:

1. Квантово-химический расчет порога полевой эмиссии электронов из коротких бор-нитридных нанотрубок / О. Б. Томилин, Е. В. Родионова, **Е. А. Родин**, Н. А. Поклонский, А. В. Князев // Журнал прикладной спектроскопии. – 2024. – Т. 91, № 5. – С. 697-706. – EDN CRYSLT (Quantum chemical calculation of the field electron emission threshold from short boron-nitride nanotubes / O. B. Tomilin, E. V. Rodionova, **E. A. Rodin**, N. A. Poklonski, A. V. Knyazev // Journal of Applied Spectroscopy. – 2024. – Vol. 91, No. 5. – P. 1032-1041. – DOI 10.1007/s10812-024-01817-6).

2. Emission properties of boron and nitrogen doped ultrashort carbon nanotubes / O. B. Tomilin, E. V. Rodionova, **E. A. Rodin**, A. V. Knyazev // Applied Surface Science. – 2024. – Vol. 669. – P. 160433. – DOI 10.1016/j.apsusc.2024.160433. – EDN QDYBST.

3. Зависимость энергии эмиссионных молекулярных орбиталей в коротких открытых углеродных нанотрубках от электрического поля / О. Б. Томилин, Е. В. Родионова, **Е. А. Родин**, Н. А. Поклонский, И. И. Аникеев, С. В. Раткевич // Физика твердого тела. – 2022. – Т. 64, № 3. – С. 359-364. – DOI 10.21883/FTT.2022.03.52097.201. – EDN ZJILEF (Dependence of the energy of emission molecular orbitals in short open carbon nanotubes on the electric field / O. B. Tomilin, E. V. Rodionova, **E. A. Rodin**, N. A. Poklonski, I. I. Anikeev, S. V. Ratkevich // Physics of the Solid State. – 2022. – Vol. 64, No. 3. – P. 359. – DOI 10.21883/pss.2022.03.53191.201. – EDN JMMCMO).

4. Томилин, О. Б. Исследование устойчивости модели полевой эмиссии электронов из углеродных нанотрубок к изменению их геометрических параметров / О. Б. Томилин, Е. В. Родионова, **Е. А. Родин** // Журнал

физической химии. – 2021. – Т. 95, № 9. – С. 1396-1398. – DOI 10.31857/S0044453721090296. – EDN HMOOTI (Tomilin, O. B. Studying the Resistance of the Model of Field Emission of Electrons from Carbon Nanotubes to a Change in Their Geometric Parameters / O. B. Tomilin, E. V. Rodionova, **E. A. Rodin** // Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2021. – Vol. 95, No. 9. – P. 1883-1885. – DOI 10.1134/S0036024421090296. – EDN RIIVPX).

5. Томилин, О. Б. Механизм полевой эмиссии электронов в одностенных углеродных нанотрубках / О. Б. Томилин, Е. В. Родионова, **Е. А. Родин** // Журнал физической химии. – 2020. – Т. 94, № 8. – С. 1242-1247. – DOI 10.31857/S0044453720080269. – EDN NALEJF (Tomilin, O. B. Mechanism of the Field Emission of Electrons in Single-Walled Carbon Nanotubes / O. B. Tomilin, E. V. Rodionova, **E. A. Rodin** // Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2020. – Vol. 94, No. 8. – P. 1657-1662. – DOI 10.1134/S0036024420080269. – EDN SXJPXJ).

6. Simulations of emission properties of carbon nanobelts / O. B. Tomilin, E. V. Rodionova, **E. A. Rodin**, V. I. Soldatova, T. S. Koscheeva // Fullerenes Nanotubes and Carbon Nanostructures. – 2020. – Vol. 28, No. 2. – P. 129-134. – DOI 10.1080/1536383X.2019.1680979. – EDN PKKSPD.

7. The effect of carbon nanotube modifications on their emission properties / O. B. Tomilin, E. V. Rodionova, **E. A. Rodin**, M. D. Poroshina, A. S. Frolov // Fullerenes Nanotubes and Carbon Nanostructures. – 2020. – Vol. 28, No. 2. – P. 123-128. – DOI 10.1080/1536383X.2019.1680978. – EDN AURJLK.

8. Influence of admixture atom chemisorption on properties of p-electron conjugated system of open carbon nanotubes / O. B. Tomilin, E. V. Rodionova, **E. A. Rodin**, E. E. Muryumin // Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics. – 2018. – Vol. 9, No. 1. – P. 70-72. – DOI 10.17586/2220-8054-2018-9-1-70-72. – EDN YQVNYM.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы от:

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Нижегородский государственный

технический университет им. Р.Е. Алексеева», кафедра «Технология электрохимических производств и химия органических веществ», ведущей организации. В качестве **замечаний и вопросов** отмечено следующее:

1. Анализ представленных в литературе сведений о влиянии дефектов в поверхностной структуре нанотрубок на их эмиссионные свойства не в полной мере отражает современный уровень рассмотрения проблемы.

2. Представляется необходимым более детально обосновать возможность переноса результатов, полученных для ультракоротких нанотрубок, протяженностью $\sim 1,5$ нм, на свойства реальных нанотрубок с протяженностью порядка микрона.

3. В диссертации проводилась оптимизация геометрии и расчеты электронных характеристик модельных макромолекул в рамках метода DFT с использованием различных базисных наборов: 6-31G, 6-31G+ и 6-31G++. Однако сравнение результатов этих расчетов, хотя бы, на примере нескольких систем не приводится, что несколько снижает доказательность положения о возможности использования в расчетах более ограниченного базиса 6-31G.

4. Поскольку основной целью диссертационной работы является «исследование электронных свойств нанотрубок хиральности «зигзаг» и «кресло» с модифицированной поверхностью и их эмиссионных свойств на основе теории полевой эмиссии электронов из углеродных нанотрубок», было бы целесообразно включить в рассмотрение сравнение эмиссионных свойств нанотрубок, имеющих центрами эмиссии боковую и торцевую поверхность.

5. В диссертации встречаются неудачные выражения, например, «сопряженные системы р-электронов имеют свои собственные системы молекулярных орбиталей» (стр. 28). Также имеются некоторые неточности в формулировках и опечатки.

Кеткова Сергея Юлиевича, доктора химических наук, профессора, ведущего научного сотрудника, заведующего лабораторией строения металлоорганических и координационных соединений ФГБУН «Институт

металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева» РАН, официального оппонента. В качестве **вопросов и замечаний** отмечено следующее:

1) При формулировке задач диссертационного исследования не отражен анализ энергий атомизации и относительной устойчивости изученных нанотрубок, которому посвящена первая треть главы 3.

2) Литературный обзор следовало дополнить ссылками на работы, имеющими прямое отношение к тематике диссертации. Вот лишь несколько примеров по отдельным разделам.

- Квантово-химические расчеты CNT и BNNT:

B.-Q. Dai, G.-L. Zhang, J.-X. Zhao, A DFT/B3LYP Computational Study of Boron-Nitride Nanotubes, Journal of the Chinese Chemical Society, 2003, 50, 525-528;

X. Hu et al., Density functional theory study on nitrogen-doped carbon nanotubes with and without oxygen adsorption: the influence of length and diameter, New J. Chem., 2011, 35, 2601-2606;

R. Takassa et al., Electronic and optical properties of ultra-small diameter armchair carbon and boron nitride nanotubes by PBE, TB-mBJ and YS-PBE0 functionals, Diamond and Related Materials, 2022, 123(1):108863.

- Влияние допирования CNT атомами бора и азота:

R. Miao et al., Single walled carbon nanotubes band gap width measurement and the influence of nitrogen doping research, Phys. Chem. Chem. Phys., 2024, 26, 1616-1624;

G. G. Fuentes et al., Formation and electronic properties of BC₃ single-wall nanotubes upon boron substitution of carbon nanotubes, Physical Review B, 2004, 69, 245403.

- Влияние внешнего электрического поля на ширину энергетической щели CNT и BNNT:

Khoo, K.H.; Mazzoni, M.S.C.; Louie, S.G. Tuning the electronic properties of boron nitride nanotubes with transverse electric field: A giant de Stark effect. Phys. Rev. B 2004, 69, 201401-201404 (R);

Chen, C.-W.; Lee, M.-H.; Clark, S.J. Band gap modification of single-walled carbon nanotube and boron nitride nanotube under a transverse electric field. *Nanotechnology* 2004, 15, 1837-1843;

Chegel, R.; Behzad, S. Electro-optical properties of zigzag and armchair boron nitride nanotubes under a transverse electric field: Tight binding calculations. *J. Phys. Chem. Solids* 2012, 73, 154-161.

В приведенных работах зачастую оцениваются параметры, аналогичные тем, что были рассчитаны в диссертации. Сравнение результатов позволило бы более объективно судить о надежности количественных характеристик, приведенных в диссертационной работе.

3) Автор не анализирует возможность существования основного электронного состояния с открытой оболочкой для изученных систем, хотя известно, что углеродные нанотрубки могут находиться в высокоспиновых состояниях. «Свободные валентности» атомов углерода в CNT, содержащих дефекты поверхности (например, вакансии V1 на рис. 13 дисс., с.37), также указывают на такую возможность. В работу было бы полезно включить небольшую часть, посвященную анализу распределения заряда в изученных системах.

4) Не совсем корректно сравнивать энергию атомизации нанотрубок в расчете на один атом и энергию диссоциации Янус-трубок, приходящуюся на одну связь (с. 48 дисс., с. 11 автореф.). Для сравнения следует брать энергию атомизации нанотрубок в расчете на одну связь, а эта величина будет примерно на треть меньше, чем рассчитанная на один атом.

5) При оценке влияния концентрации атомов N и B на изменение критической напряженности поля (рис. 29 дисс., с. 67-68) автору следовало привести интервалы значений в соответствии с табл. 11.

6) В тексте диссертации встречаются спорные утверждения, которые нуждаются в дополнительном обосновании или пояснении смысла, например:

- О ридберговских орбиталях (с. 30 дисс.): «В π -сопряженных системах их энергия, как правило, составляет порядка 15 эВ»

- $\epsilon(BN_{\text{пол}})$ – энергия углеродной «половины» модельной янус-нанотрубки» (с.47 дисс.).

- НВМО и ВЗМО определяют «распределение электронной плотности по каркасу нанотрубки» (с. 56 дисс.)

- «существование ДМО обеспечивает появление эмиссионного тока в УНТ с дефектами-вакансиями в поверхности нанотрубки практически при любой величине напряженности приложенного электрического поля» (с. 80 дисс.).

- «...установление предполагаемых результатов является обоснованной теоретической основой для формирования практических рекомендаций по совершенствованию получения катодных материалов» (с.82 дисс.).

Маслова Михаила Михайловича, доктора физико-математических наук, доцента, заведующего кафедрой физики твердого тела и наносистем (№70) института лазерных и плазменных технологий ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», официального оппонента. В качестве **замечаний и рекомендаций** отмечено следующее:

1. В работе недостаточно полно раскрыты возможности и ограничения применяемых методов квантово-химического моделирования электронной структуры нанотрубок. Требуется более детальное обоснование выбранного уровня теории DFT/B3LYP/6-31G.

2. В работе недостаточно подробно рассмотрено влияние хиральности углеродных нанотрубок на их эмиссионные свойства. Данный аспект требует более глубокого анализа, поскольку непосредственно связан с практическим применением полученных результатов и пониманием физических механизмов эмиссии электронов.

3. В соответствующем разделе диссертации отсутствует прямая формулировка основных защищаемых положений. Вместо отсылок к другим разделам работы необходимо четко сформулировать конкретные научные положения, выносимые на защиту.

Вырко Сергея Александровича, кандидата физико-математических наук, старшего научного сотрудника кафедры физики полупроводников и наноэлектроники физического факультета Белорусского государственного университета. В качестве **замечаний** отмечено следующее:

1. В параграфе 2.3 обоснован выбор метода, однако не указано, чем был обусловлен выбор программного пакета FireFly QC, учитывая наличие альтернативных пакетов, например ORCA.

2. Не указано общее количество проанализированных моделей. Также отсутствует информация о программном обеспечении, использованном для визуализации полученных данных.

Наумова Владимира Ивановича, доктора химических наук, профессора, заведующего кафедрой производственной безопасности, экологии и химии образовательно-научного института физико-химических технологий и материаловедения федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева». Отзыв положительный, без замечаний.

Прозорова Дмитрия Алексеевича, доктора химических наук, главного научного сотрудника научно-исследовательской лаборатории синтеза, исследований и испытания каталитических и адсорбционных систем для процессов переработки углеводородного сырья федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Ивановский государственный химико-технологический университет». В качестве **вопроса** отмечено следующее:

Чем обусловлен выбор функционала B3LYP и базисного набора 6-31G? Функционал B3LYP описан в работе A. D. Becke, J. Chem. Phys. 98, 5648 (1993), а базисный набор 6-31G(d,p) в работе Franel, Michelle M., Pietro, William J., Hehre, Warren J., Binkley, J. Stephen, Gordon, Mark S., DeFrees, Douglas J., Pople, John A./J. Chem. Phys. 77. 3654-3665 (1982).

Успенской Ирины Александровны, доктора химических наук, профессора, профессора кафедры физической химии федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова». В качестве **замечания** отмечено следующее:

В качестве небольшого замечания можно отметить отсутствие подробного обсуждения возможностей практической реализации полученных результатов, однако это не снижает ценности диссертационной работы в целом.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается наличием профильных публикаций и экспертизы в научных сферах, коррелирующих с темой диссертации.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- **разработан** метод качественной оценки порогового значения появления полевой эмиссии в цилиндрических сопряженных молекулах, обеспечивающий высокую точность анализа и подтвержденный расчетами для нанотрубок различного состава и структуры;

- **предложено**, что полевая эмиссия электронов из нанотрубок, схожих по составу с углеродными, происходит вследствие перемещения эмиссионной молекулярной орбитали в валентную зону, ее заполнения электронами и последующего туннелирования электронов в вакуум;

- **доказано**, что описанный подход может быть использован для анализа и прогнозирования эмиссионных свойств нанотрубок различного состава и структуры;

- **новых понятий и терминов** не вводилось.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

- **доказано**, что представленная интерпретация механизма полевой эмиссии электронов из цилиндрических сопряженных наноструктур может

быть использована для прогнозирования и оценки влияния состава и структуры поверхности на эмиссионные свойства нанотрубок;

- **применительно к проблематике диссертации результативно использован** квантово-химический подход в рамках теории функционала плотности (DFT, гибридный функционал B3LYP, базисный набор 6-31G) для моделирования геометрии и электронной структуры нанотрубок;

- **изложены** доказательства изменения электронных и эмиссионных свойств нанотрубок с различным составом и структурой поверхности под действием постоянного электрического поля;

- **раскрыто** влияние ключевых факторов (состав, диаметр, наличие гетероатомов и дефектов в структуре, ориентация внешнего электрического поля) на эмиссионные свойства нанотрубок;

- **изучено** поведение эмиссионных молекулярных орбиталей в модельных нанотрубках под действием постоянного электрического поля;

- **проведена модернизация** представлений о влиянии характера сопряжения в криволинейных наноструктурах на свойства сопряженной системы p-электронов.

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

- **разработан** и внедрен квантово-химический подход, позволяющий качественно оценивать эмиссионные свойства нанотрубок; показано, что он хорошо описывает экспериментальные и теоретические результаты и может быть использован для предсказания эмиссионных свойств широкого круга объектов;

- **определено** влияние замещения атомов углерода на гетероатомы (азот, бор) на эмиссионные свойства нанотрубок, при котором азот снижает пороговое значение напряжения поля для появления полевой эмиссии, а бор его повышает; наилучшие эмиссионные характеристики показали янус-нанотрубки; вакансии могут служить активными центрами эмиссии, при этом

их небольшие концентрации не оказывают существенного влияния на эмиссионные свойства нанотрубок;

- **созданы** теоретические рекомендации по селективному учету параметров (состава, диаметра, наличия гетероатомов и дефектов в структуре, ориентации внешнего электрического поля) при разработке катодных материалов.

- **представлен** метод качественной оценки порогового значения напряженности электрического поля для появления полевой эмиссии в цилиндрических сопряженных молекулах, результаты создают теоретическую основу для целенаправленного дизайна катодных материалов на основе нанотрубок, применимых в электровакуумных приборах и устройствах наноэлектроники.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

- **для экспериментальных работ** совпадение результатов квантово-химического моделирования эмиссионных свойств нанотрубок с данными, опубликованными другими учеными, работающими в данной области;

- **теория** согласуется с современными представлениями о полевой эмиссии электронов из углеродных нанотрубок, базирующимися на теории Фаулера-Нордгейма; результаты согласуются с опубликованными экспериментальными данными отечественных и зарубежных авторов по теме диссертации;

- **идея базируется** на анализе литературных данных, посвященных теоретическим и экспериментальным исследованиям эмиссионных свойств нанотрубок;

- **использованы** современные научные представления об in-plane- и π -сопряжении p-электронов наноструктурах;

- **установлено** качественное совпадение между теоретическими выводами о влиянии различных факторов на эмиссионные свойства наноструктур и экспериментальными результатами;

- **использован** апробированный и широко признанный в научном сообществе квантово-химический метод теории функционала плотности (DFT), реализованный в пакете прикладных программ FireFly для моделирования геометрической структуры и электронных свойств нанотрубок различного состава и структуры поверхности.

Личный вклад соискателя заключается в следующем: проведение квантово-химических расчетов с использованием программного комплекса FireFly, участие в обсуждении, обработке и интерпретации полученных данных, представление и обсуждение результатов на конференциях различного уровня, подготовка текстов и материалов для научных публикаций.

Диссертация охватывает основные вопросы поставленной научной задачи и соответствует критерию внутреннего единства, что подтверждается наличием обоснованным и целенаправленным планом исследований, формулировкой цели работы и выводов на основании полученных результатов.

Диссертационная работа представляет собой завершенное научное исследование, содержащее новые научные результаты и обладающее как теоретической, так и практической значимостью. Диссертация по форме и содержанию соответствует требованиям пунктов 9-14 Положения «О порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842 (в текущей редакции), предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата наук.

На заседании 23 декабря 2025 г. диссертационный совет принял решение: за разработку подхода прогнозирования эмиссионных свойств цилиндрических сопряженных молекул, который может быть использован для целенаправленного дизайна катодных материалов на основе нанотрубок, присудить Родину Е.А. ученую степень кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия (химические науки).

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из которых 5 докторов наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия, участвующих в заседании, из 21 человека, входящего в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за 17, против 0, нейтральных бюллетеней 0.

Заместитель председателя
диссертационного совета 24.2.340.04
д.х.н., проф.



Нипрук Оксана Валентиновна

Ученый секретарь диссертационного
совета 24.2.340.04
д.х.н., доц.

Буланов Евгений Николаевич

23 декабря 2025 г.