

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Мурзашева Аркадия Ислибаевича  
«Электронное строение, оптические спектры и идентификация  
фуллеренов и углеродных нанотрубок с сильным межэлектронным  
взаимодействием в модели Хаббарда»  
на соискание ученой степени доктора физико-математических наук  
по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»

Диссертация Аркадия Ислибаевича Мурзашева посвящена исследованию электронного строения таких углеродных наносистем, как нанотрубки (УНТ) и фуллерены, которые, благодаря наноразмерам и характерным электронным и оптическим свойствам, могут использоваться (и уже используются) в различных областях науки, техники и медицины. Наиболее перспективно их применение в микроэлектронике. Поэтому за последние три десятилетия этой проблеме было посвящено большое число как теоретических, так и экспериментальных исследований. Теоретические работы, выполненные по данной тематике ранее, основывались на традиционном зонном подходе. Однако были получены теоретические предсказания, плохо согласующиеся с экспериментальными данными. Поэтому необходимы дальнейшие исследования, выходящие за рамки упомянутого подхода.

Именно таковым является теоретическое исследование электронно-энергетической структуры фуллеренов и углеродных нанотрубок, проведенное Мурзашевым А. И. в рамках модели Хаббарда, которая позволяет учесть сильное одноузельное кулоновское взаимодействие  $\pi$ -электронов, которое достигает значений, больших 10 эВ. Для этого в диссертационной работе Мурзашева А. И. в приближении статических флуктуаций для модели Хаббарда рассчитывается энергетический спектр фуллеренов и УНТ, на основе которого моделируются спектры оптического поглощения данных материалов.

В работе показано, что энергетический спектр фуллеренов и УНТ, благодаря сильному межэлектронному взаимодействию, разбивается на две подзоны, именуемые хаббардовскими, а щель между ними составляет примерно 1 эВ. При этом верхняя хаббардовская подзона оказывается полностью вакантной (в случае, когда число  $\pi$ -электронов равно числу узлов), а нижняя – полностью пустой. Состояниям верхней подзоны

соответствуют состояниям с двукратным занятием электронами узлов, а нижней – с однократным.

Это обстоятельство полностью меняет картину электронного строения фуллеренов и УНТ. Для того, чтобы оценить адекватность описанного подхода, необходимо было получить с его помощью спектры оптического поглощения фуллеренов и УНТ и сравнить их с результатами экспериментальных наблюдений.

В диссертации исследованы следующие фуллерены:  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ ,  $C_{72}$ ,  $C_{74}$ ,  $C_{76}$ ,  $C_{80}$ ,  $C_{82}$ , и УНТ различных хиральностей как конечной, так и бесконечной длины. Получены результаты, которые хорошо на качественном уровне согласуются с соответствующими экспериментальными данными.

Особо следует отметить результаты, полученные для кластеров УНТ. В частности, автору удалось объяснить, почему при достижении кластером 60–70 атомов растущая УНТ имеет склонность к сворачиванию в фуллерен, но при преодолении этого числа нанотрубка может расти до тех пор, пока условия для ее синтеза сохраняются.

Результаты, выносимые на защиту, подтверждаются их физической обоснованностью, применением современных, апробированных методов расчета, а также хорошим качественным согласием полученных результатов с имеющимися экспериментальными данными. Автореферат дает полное представление о диссертации, основные результаты которой опубликованы в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК, и научных журналах, входящих в международные базы Scopus / Web of Science, а также представлены на различных всероссийских и международных конференциях.

Материал в автореферате изложен последовательно и аргументированно, позволяет получить полное представление о диссертации. Диссертация Мурзашева Аркадия Ислибаевича «Электронное строение, оптические спектры и идентификация фуллеренов и углеродных нанотрубок с сильным межэлектронным взаимодействием в модели Хаббарда» на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, представляет собой самостоятельную и законченную научно-квалификационную работу на актуальную тему. Научная новизна в диссертационном исследовании не вызывает сомнений, выносимые на защиту положения имеют убедительную доказательную базу, а разработанные теоретические положения можно квалифицировать как научное достижение.

Таким образом, диссертация Мурзашева Аркадия Ислибаевича соответствует требованиям п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (в редакции от 28 августа 2017 г.), а ее автор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Ведущий научный сотрудник лаборатории  
физики нелинейных сред ИФПМ СО РАН,  
доктор физико-математических наук  
(01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»),  
профессор

Егорушкин Валерий Ефимович

04 сентября 2018 г.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт физики прочности и материаловедения  
Сибирского отделения Российской академии наук  
Почтовый адрес: 634055, г. Томск, пр. Академический, 2/4;  
Телефон: (3822) 49-18-81; E-mail: root@ispms.tomsk.ru;  
www.ispms.ru

Подпись доктора физико-математических наук, профессора, ведущего  
научного сотрудника лаборатории физики нелинейных сред ИФПМ СО РАН  
В. Е. Егорушкина удостоверяю



Ученый секретарь Ученого совета  
ИФПМ СО РАН

Н. Ю. Матолыгина