

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

Фуллерены и углеродные нанотрубки (УНТ) являются объектами исследований и теоретиков, и экспериментаторов три последних десятилетия, что связано с уникальностью свойств и возможностями применения этих материалов в нанoeлектронике, энергетике, медицине, биологии и т.д. Однако, до сих пор корректное теоретическое описание электронной структуры углеродных наноматериалов не получено. Это не позволяет прогнозировать многие их свойства, в частности, оптические - для вновь синтезируемых фуллеренов и УНТ, а это значительно бы удешевило процедуру их внедрения в промышленность.

По мнению автора данного диссертационного исследования, традиционно используемые для описания электронной структуры теоретические представления, основанные на зонных подходах, не учитывают сильное внутриузельное кулоновское взаимодействие, достигающее 10 эВ в рассматриваемых системах. Именно поэтому многие результаты теоретических исследований, основанные на таких представлениях, не согласуются с результатами экспериментальных наблюдений. И именно поэтому диссертация Мурзашева Аркадия Ислибаевича посвящена изучению влияния сильного внутриузельного кулоновского взаимодействия на электронное строение фуллеренов и углеродных нанотрубок.

Исследование электронного строения фуллеренов и УНТ в данной работе проводится в рамках модели Хаббарда, которая позволяет корректно учесть кулоновское взаимодействие π -электронов на одном узле. В приближении статических флуктуаций для модели Хаббарда получены энергетические спектры, которые характеризуются расщеплением энергетических уровней системы на две подгруппы зон, так называемые хаббардовские подзоны. Следовательно, можно говорить о существенной перестройке энергетического спектра фуллеренов и УНТ.

Это существенно противоречит результатам, полученным с помощью простых зонных расчетов. Например, вследствие такой перестройки электронной подсистемы перестает работать «правило кратности трем», согласно которому УНТ являются металлическими, если разность индексов хиральности кратна трем, и диэлектриками, если это условие не выполняется.

Результаты, полученные для фуллеренов, являются, на мой взгляд, самыми интересными и полезными с практической точки зрения. Проблема идентификации вновь синтезированных фуллеренов и комплексов на их основе является очень актуальной. А.И. Мурзашев предложил очень элегантное решение этой проблемы – используя приближение молекулярных орбиталей и полученные для этих систем электронные спектры, он построил спектры оптического поглощения для целого ряда фуллеренов C_{60} , C_{70} , C_{72} , C_{74} , C_{76} , C_{80} , C_{82} . Сравнивая их с экспериментальными спектрами оптического поглощения, он показал, как можно проводить процедуру идентификации фуллеренов и эндодральных комплексов на их основе. Также следует отметить результаты, полученные в диссертации для УНТ конечных и бесконечных размеров и различных хиральностей, которые на хорошем качественном уровне согласуются с соответствующими экспериментальными данными.

Следует отметить, что выносимые на защиту положения очень аргументированы, физически обоснованы и получены в рамках хорошо известной модели Хаббарда. Получены результаты, качественно согласующиеся с экспериментальными данными. Автореферат дает полную информацию о диссертации, об алгоритме исследования и полученных результатах. Научные результаты и выводы данного исследования опубликованы в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК, и научных журналах, входящих в международные базы Scopus / Web of Science. Также они представлены на различных всероссийских и международных конференциях.

Таким образом, диссертация А. И. Мурзашева «Электронное строение, оптические спектры и идентификация фуллеренов и углеродных нанотрубок с сильным межэлектронным взаимодействием в модели Хаббарда», посвященная очень актуальной теме, является завершенной научно-квалификационной работой. Она соответствует всем требованиям действующего «Положения

о присуждении ученых степеней», предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора наук, а сам Мурзашев Аркадий Ислибаевич, без сомнений, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Главный научный сотрудник лаборатории клатратных соединений ИНХ им. А. В. Николаева СО РАН, доктор физико-математических наук (01.04.02 – Теоретическая физика)

Белослудов Владимир Романович

20 сентября 2018 г.

Сведения об организации:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт неорганической химии им. А. В. Николаева

Сибирского отделения Российской академии наук

630090, г. Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 3; (383) 330-94-90;

niic@niic.nsc.ru; <http://www.niic.nsc.ru>

Подпись В. Р. Белослудова удостоверяю

Ученого секретаря ИНХ СО РАН,

доктор химических наук



О. А. Герасько