

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) давно вызывают повышенный интерес исследователей благодаря своим необычным свойствам и большим перспективам применения в биологии, медицине, энергетике, металлургии и электронике. Они могут быть использованы для создания водородных накопителей и полевых эмиттеров, преобразователей энергии, таргетной доставки лекарств и т.д., что делает эти наноструктуры очень привлекательными, а их изучение - **актуальным**.

Несмотря на интенсивные исследования, остается открытой проблема теоретического описания электронных состояний углеродных наноматериалов. Из диссертационного исследования А.И.Мурзашева следует, что теоретические представления об электронном строении, полученные с помощью зонных расчетов, не позволяют корректно описать электронную структуру фуллеренов и УНТ из-за того, что в них не учитывалось сильное кулоновское внутриузельное взаимодействие π -электронов. Этим и была вызвана необходимость проведения диссертационного исследования Мурзашева Аркадия Ислибаевича.

Роль внутриузельного кулоновского взаимодействия в формировании электронной структуры фуллеренов, углеродных нанотрубок и эндодральных комплексов изучается в работе А.И.Мурзашева с помощью модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций. Получены энергетические спектры для целого ряда фуллеренов (C_{60} , C_{70} , C_{72} , C_{74} , C_{76} , C_{80} , C_{82}) и УНТ как конечных размеров, так и бесконечных. Все они характеризуются расщеплением энергетических уровней системы на две подгруппы так называемых хаббардовских зон. Такая перестройка энергетического спектра фуллеренов и УНТ описана **впервые**. Она приводит к тому, что перестает выполняться общепринятое

«правило кратности трем», предписывающее УНТ быть металлами, если разность индексов хиральности кратна трем, и диэлектриками, если это не так.

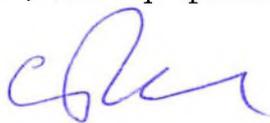
Следующим важным, с моей точки зрения, результатом работы А.И.Мурзашева является объяснение свертывания растущей УНТ в фуллерены C_{60} и C_{70} вследствие немонотонной зависимости энергии УНТ от числа атомов. **С практической точки зрения большое значение** имеет проведенный в диссертации А.И.Мурзашева анализ теоретических и экспериментальных спектров оптического поглощения, позволивший идентифицировать изомеры фуллеренов и комплексы на их основе.

В заключение отмечу, что положения, выносимые на защиту, сформулированы четко, выбранные в работе модель и приближения **физически обоснованы и хорошо апробированы**. Полученные результаты качественно согласуются с имеющимися экспериментальными данными. **Автореферат дает полное представление о диссертации**, способах решения поставленных задач и полученных результатах. Последние широко опубликованы как в российских рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК, так и в высокорейтинговых научных журналах, входящих в международные базы Scopus / Web of Science. Выводы и результаты исследования представлены на нескольких всероссийских и международных конференциях.

Исходя из вышесказанного, диссертацию А. И. Мурзашева «Электронное строение, оптические спектры и идентификация фуллеренов и углеродных нанотрубок с сильным межэлектронным взаимодействием в модели Хаббарда», можно считать **завершенной научно-квалификационной работой**, посвященной очень актуальной теме. Она, безусловно, соответствует всем требованиям действующего «Положения о присуждении ученых степеней», предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора наук, а ее автор, **Мурзашев Аркадий Ислибаевич, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния**.

Профессор исследовательской школы физики высокоэнергетических процессов Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский

политехнический университет», доктор физико-математических наук (01.04.10–
Физика полупроводников)



Гриняев Сергей Николаевич

24 сентября 2018 г.

Сведения об организации:

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»

Почтовый адрес: Россия, 634050, г. Томск, проспект Ленина, 50, дом 30; Телефон: +7-913-102-92-74; e-mail: tpu@tpu.ru; адрес сайта: <http://tpu.ru>

Подпись С.Н. Гриняева удостоверяю

Ученый секретарь

Ученого совета НИ ТПУ



Анашьева Ольга Афанасьевна