

## ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертацию 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»

Важность изучения фуллеренов и углеродных нанотрубок (УНТ) обусловлена, в первую очередь, все возрастающими объемами их производства. Так, например, цена фуллерена C<sub>60</sub> за последние 20 лет упала с 10000 до 10-15 долларов за грамм. Существенное влияние на цену оказывает чистота продукта, т.е. является ли продукт чистым фуллереном или смесью различных фуллеренов. Аналогичным образом дело обстоит с углеродными нанотрубками. Принимая во внимание, что все-таки самым дешевым и оперативным способом контроля чистоты продукта является оптический, изучение оптических спектров представляет особый интерес. Уже одно это обстоятельство делает тематику работы Мурзашева А.И. **актуальной.**

Как практическое, так и теоретическое исследование фуллеренов и УНТ исторически продвигалось хорошо проверенным методом «от простого к сложному». Постепенно стало понятно, что простейшим одноэлектронным гамильтонианом все известные свойства фуллеренов и УНТ не описать, и необходимо продвижение в сторону более реалистичных моделей, учитывающих реальную физику процессов в этих веществах. По-видимому, самый главный шаг в этом направлении – это учет кулоновского взаимодействия электронов. За прошедшее время было предложено несколько подходов к учету этого эффекта. В основном использовалась диаграммная техника, заимствованная из квантовой электродинамики, и приближения различной степени самосогласованности. В этой ситуации тем

ценнее тот факт, что автору диссертации удалось найти свой оригинальный подход, основанный на методе функций Грина, и довести исследование до сравнения с экспериментом. Подход автора, основанный на методе функций Грина, без всякого сомнения закрывает вопрос о **новизне диссертационной работы**, а сравнение с экспериментом доказывает ее **достоверность**.

Диссертационная работа А. И. Мурзашева состоит из введения, одной обзорной и четырех оригинальных глав, заключения, списка литературы и приложения. Работа написана на 256 страницах и содержит 124 рисунка. Список цитируемой литературы состоит из 143 источников.

*Во введении* обоснована актуальность данного исследования, сформулированы цель работы и основные задачи, описаны научная новизна и практическая ценность полученных результатов, приведены основные положения, выносимые на защиту, а также указана апробация работы.

*В первой главе* приведен обзор литературы по теме исследования. Приведено подробное описание модели Хаббарда, как простейшей модели, учитывающей кулоновское взаимодействие электронов. Описано приближение статических флуктуаций для модели Хаббарда и пояснен смысл обрыва цепочки уравнений для функций Грина.

*Во второй главе* в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций вычислен энергетический спектр фуллеренов C<sub>60</sub>, C<sub>70</sub>, C<sub>72</sub>, C<sub>74</sub>. Учет кулоновского взаимодействия, как и обычно в модели Хаббарда, приводит к появлению двух подзон: причем «верхняя» вакантна, а «нижняя» полностью заполнена. Оптическое поглощение в этом случае обязано своему существованию переходами из «нижней» в «верхнюю» подзоны. Далее, на основании полученных значений энергии в приближении молекулярных орбиталей были вычислены спектры оптического поглощения вышеперечисленных фуллеренов и комплексов на их основе. Проведено сравнение с соответствующими экспериментальными данными. Показано, что имеется качественное согласие между теорией и экспериментом.

*В третьей главе* сделан расчет энергетических спектров изомеров C76, C80, C82 фуллеренов и комплексов на их основе. Как и во второй главе, используя энергетические спектры в рамках приближения молекулярных орбиталей, можно получить спектры оптического поглощения изомеров перечисленных фуллеренов и комплексов на их основе. Это и было проделано. Обсуждена устойчивость фуллерена C76.

*В четвертой главе* рассмотрено изменение электронных свойств кластеров УНТ типа (5,5) при росте числа атомов в кластере от 30 до 190. Установлено, что с ростом числа атомов ширина верхней и нижней энергетических подзон стремятся к постоянному значению. Щель между подзонами так же стремится к постоянному значению. Проведены вычисления средней энергии, приходящейся на один атом, в зависимости от количества атомов в кластере. Показано, что данная зависимость имеет максимум при размере кластера порядка 60–70 атомов. Это можно связать с тем фактом, что в равновесных условиях рост УНТ прекращается путем образования фуллеренов C60, C70.

*В пятой главе* приведены результаты расчета энергетического спектра бесконечных УНТ типов (5,5), (10,0), (9,0), (12,0), (15,0), (11,9), (12,8). Расчет сделан в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций. Построены кривые плотности состояний перечисленных УНТ и вычислены спектры оптического поглощения. Установлено, что все названные УНТ при учете только ближайших перескоков  $\pi$ -электронов являются полупроводниками с энергетической щелью порядка 1 эВ. Если дополнительно ввести перескок  $\pi$ -электронов на более удаленные узлы, щель уменьшается до 0.01 эВ. Приведен физический механизм данного эффекта, который связан с перестройкой электронного спектра. Смоделированные на основе полученных энергетических спектров спектры оптического поглощения находятся в хорошем качественном согласии с экспериментом.

*В Заключении* приведены основные результаты и выводы диссертационного исследования.

В Приложении приведены формулы, которые дополняют основной текст диссертации.

Результаты, выносимые на защиту, как уже указывалось ранее, являются новыми, математически и физически обоснованными. Достоверность результатов обеспечена как сравнением с экспериментом, так и математически корректной постановкой задачи, использованием современных методик решения уравнений на функции Грина. Отмечу, что само приближение статических флуктуаций было использовано ранее в других задачах, в том числе и автором отзыва (ТМФ, 88:1 (1991), 104–114), и сомнений в его работоспособности нет никаких.

Научная новизна диссертации прежде всего определяется использованием метода функций Грина и приближением статических флуктуаций. Это позволило учесть в простейшем случае кулоновское взаимодействие электронов и, главное, довести расчеты до сравнения с экспериментально изученными энергетическими и оптическими спектрами УНТ и фуллеренов. Выявлены также физические причины, приводящие к тем или иным особенностям в энергетических и оптических спектрах УНТ и фуллеренов.

К диссертации имеются несколько замечаний:

1. В диссертации не проведено сравнение полученных результатов с результатами, полученными другими методами, например, диаграммной техникой. Насколько сильно отличались бы полученные спектры от спектров, полученных в приближении Хаббард-1 или Хаббард-2?

2. На стр. 161 диссертации приведены параметры для модели Хаббарда. Так, интеграл перескока ( $V$  в обозначениях автора) взят равным 1 эВ, а хаббардовский параметр  $U$  взят примерно 7 эВ. Непонятно, откуда взялись вообще эти цифры. Интеграл перескока определяется длиной связи и для всех подобного типа моделей берется как 2,7 эВ, а оценки хаббардовского параметра, например, методом MNDO дают величины в районе 10–12 эВ. Отметим, что на стр. 17 автор приводит именно 10–12 эВ для оценки кулоновского взаимодействия.

3. К сожалению, в диссертации ничего не сказано о графеновых нанолентах (результаты для которых можно легко получить, изменив граничные условия для УНТ) и про актуальный до сих пор графен. Впрочем, это замечание носит, скорее, характер пожелания.

4. В четвертом защищаемом положении слово «подходы» лишнее.

Указанные недостатки не влияют на высокую оценку диссертации и на ее научное значение. Результаты диссертации опубликованы в российских и зарубежных журналах, включенных в Web of Science, рекомендованных ВАК, докладывались на международных и всероссийских конференциях различного уровня. **Автореферат полностью отражает содержание диссертации.**

Полученные результаты можно рекомендовать для использования в академических институтах и вузах, в частности: Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Институт проблем химической физики РАН, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Казанский федеральный университет, Волгоградский государственный университет.

Кроме того, материалы диссертации могут быть использованы для подготовки соответствующих курсов для студентов и магистрантов ряда специальностей, связанных с нанотехнологиями.

Диссертационная работа Мурзашева Аркадия Ислибаевича «Электронное строение, оптические спектры и идентификация фуллеренов и углеродных нанотрубок с сильным межэлектронным взаимодействием в модели Хаббарда» представляет собой законченную, актуальную, самостоятельную научно-квалификационную работу. В ходе выполнения работы был получен ряд принципиально новых результатов.

Данная работа соответствует всем требованиям, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени доктора физико-математических наук, установленным в пункте 9 «Положения о присуждении

ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842 (в редакции от 28 августа 2017 года), а ее автор, А. И. Мурзашев, заслуживает присуждения искомой ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Официальный оппонент

профессор кафедры судебной экспертизы

и физического материаловедения ФГАОУ ВО

«Волгоградский государственный университет»,

доктор физико-математических наук

(01.04.05 – «Оптика»

01.04.10 – «Физика полупроводников и диэлектриков»),

профессор



Белоненко Михаил Борисович

08 октября 2018 г.

E-mail: [priori@volsu.ru](mailto:priori@volsu.ru)

Федеральное государственное автономное

образовательное учреждение высшего образования

«Волгоградский государственный университет»,

Почтовый адрес: 400062, г. Волгоград, просп. Университетский, 100;

Телефон: +7 (8442) 46-02-79;

E-mail: [rector@volsu.ru](mailto:rector@volsu.ru);

Адрес сайта: <http://www.volsu.ru>

Подпись Белоненко Михаила Борисовича удостоверяю

Ученый секретарь Волгоградского  
государственного университета



Лисовская Надежда Владимировна