

## СВЕДЕНИЯ О РЕЗУЛЬТАТАХ ПУБЛИЧНОЙ ЗАЩИТЫ ДИССЕРТАЦИИ

Диссертационный совет Д 212.267.07, созданный на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», извещает о результатах состоявшейся 25 октября 2018 года публичной защиты диссертации Мурзашева Аркадия Ислибаевича «Электронное строение, оптические спектры и идентификация фуллеренов и углеродных нанотрубок с сильным межэлектронным взаимодействием в модели Хаббарда» по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния на соискание ученой степени доктора физико-математических наук.

Присутствовали 18 из 24 членов диссертационного совета, из них 7 докторов наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния:

- |  |          |
|--|----------|
| 1. Багров В. Г., доктор физико-математических наук, профессор,<br>председатель диссертационного совета,                      | 01.04.02 |
| 2. Киреева И. В., доктор физико-математических наук, старший научный<br>сотрудник, ученый секретарь диссертационного совета, | 01.04.07 |
| 3. Бордовицын В. А., доктор физико-математических наук, профессор,   | 01.04.02 |
| 4. Брудный В. Н., доктор физико-математических наук, профессор   | 01.04.10 |
| 5. Гермогенов В. П., доктор физико-математических наук, профессор,   | 01.04.10 |
| 6. Давыдов В. Н., доктор физико-математических наук, старший<br>научный сотрудник  | 01.04.10 |
| 7. Коротаев А. Д., доктор физико-математических наук, профессор,   | 01.04.07 |
| 8. Лавров П. М., доктор физико-математических наук, профессор,   | 01.04.02 |
| 9. Ляхович С. Л., доктор физико-математических наук, профессор,  | 01.04.02 |
| 10. Мельникова Н. В., доктор физико-математических наук,   | 01.04.07 |
| 11. Потекаев А. И., доктор физико-математических наук, профессор,  | 01.04.07 |
| 12. Старенченко В. А., доктор физико-математических наук, профессор,   | 01.04.07 |
| 13. Толбанов О. П. доктор физико-математических наук, профессор,   | 01.04.10 |
| 14. Трифонов А. Ю., доктор физико-математических наук, профессор,  | 01.04.02 |
| 15. Тюменцев А. Н., доктор физико-математических наук, профессор,  | 01.04.07 |
| 16. Чумляков Ю. И, доктор физико-математических наук, профессор,   | 01.04.07 |
| 17. Шаповалов А. В., доктор физико-математических наук, профессор,   | 01.04.02 |
| 18. Шарапов А. А., доктор физико-математических наук, профессор,   | 01.04.02 |

**Заседание провел председатель диссертационного совета, доктор физико-математических наук, профессор Багров Владислав Гаврилович.**

По результатам защиты диссертации тайным голосованием (результаты голосования: за присуждение ученой степени – 18, против – нет, недействительных бюллетеней – нет) диссертационный совет принял решение присудить А. И. Мурзашеву ученую степень доктора физико-математических наук.

**Заключение диссертационного совета Д 212.267.07,  
созданного на базе федерального государственного автономного  
образовательного учреждения высшего образования  
«Национальный исследовательский Томский государственный университет»  
Министерства науки и высшего образования Российской Федерации,  
по диссертации на соискание ученой степени доктора наук  
аттестационное дело № \_\_\_\_\_**

решение диссертационного совета от 25.10.2018 № 13

О присуждении **Мурзашеву Аркадию Ислибаевичу**, гражданину Российской Федерации, ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация **«Электронное строение, оптические спектры и идентификация фуллеренов и углеродных нанотрубок с сильным межэлектронным взаимодействием в модели Хаббарда»** по специальности **01.04.07 – Физика конденсированного состояния** принята к защите 26.04.2018 (протокол заседания № 7) диссертационным советом **Д 212.267.07**, созданным на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации (634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, приказ о создании диссертационного совета № 105/нк от 11.04.2012).

Соискатель **Мурзашев Аркадий Ислибаевич**, 1959 года рождения.

Диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук **«О низкоэнергетических возбуждениях в многокомпонентных системах»** по специальности **01.04.02 – Теоретическая физика** защитил в 1988 году в диссертационном совете Томского государственного университета им. В. В. Куйбышева.

Работает в должности доцента кафедры физики и материаловедения в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Марийский государственный университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации; по совместительству – в должности старшего научного сотрудника лаборатории конструкционных

и функциональных материалов Сибирского физико-технического института имени академика В.Д. Кузнецова федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация выполнена на кафедре физики и материаловедения федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Марийский государственный университета» Министерства образования и науки Российской Федерации и в лаборатории конструкционных и функциональных материалов Сибирского физико-технического института имени академика В. Д. Кузнецова федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации.

Научный консультант – доктор физико-математических наук, **Мельникова Наталия Васильевна**, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», лаборатория новых материалов и перспективных технологий Сибирского физико-технического института имени академика В. Д. Кузнецова, старший научный сотрудник.

Официальные оппоненты:

**Хон Юрий Андреевич**, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, лаборатория физики нелинейных сред, заведующий лабораторией

**Белоненко Михаил Борисович**, доктор физико-математических наук, профессор, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Волгоградский государственный университет», кафедра судебной экспертизы и физического материаловедения, профессор

**Романенко Анатолий Иванович**, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт

неорганической химии им. А. В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук, лаборатория физики низких температур, заведующий лабораторией дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «**Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского**», г. Омск, в своем положительном отзыве, подписанном **Прудниковым Павлом Владимировичем** (доктор физико-математических наук, профессор, кафедра теоретической физики, профессор) указала, что, несмотря на почти тридцатилетнюю историю открытия, исследования и даже использования аллотропных соединений углерода, фуллеренов и углеродных нанотрубок (УНТ) в металлургии, машиностроении, медицине, биологии, электронике и оптике, при теоретическом описании их электронной структуры не учитывалось кулоновское взаимодействие  $\pi$ -электронов, находящихся на одном узле, которое может достигать значений  $\sim 10$  эВ. Однако еще в 1963 г. Хаббардом было установлено, что сильное кулоновское внутриузельное взаимодействие существенным образом перестраивает энергетический спектр системы. В связи с этим тема диссертационной работы является актуальной, а результаты исследования, полученные в рамках модели Хаббарда, представляют особый интерес. А. И. Мурзашевым впервые разработаны методы и теоретические положения, позволяющие в рамках модели Хаббарда, учитывающей внутриузельное кулоновское взаимодействие  $\pi$ -электронов, получать энергетические спектры УНТ и фуллеренов; выявлены физические механизмы, определяющие уникальность свойств исследуемых материалов, фуллеренов и УНТ; снят ряд противоречий между экспериментальными данными и результатами теоретических исследований, касающихся электронных и оптических свойств фуллеренов и УНТ; однозначно доказано, что изучение электронного строения фуллеренов и УНТ без учета имеющего в них место сильного кулоновского взаимодействия  $\pi$ -электронов на одном узле, всегда будет неполным. Результаты исследования позволяют по-новому взглянуть на электронное строение и свойства углеродных наносистем, на новом качественном уровне повышают точность расчетов энергетического спектра фуллеренов и УНТ и могут быть использованы при конструировании различных электронных и оптических устройств на базе данных материалов.

Соискатель имеет 32 опубликованные работы, в том числе по теме диссертации опубликовано 26 работ, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 19 работ (из них 2 статьи в зарубежных изданиях, индексируемых Web of Science, и 17 статей в российских научных журналах, переводные версии которых входят Web of Science), в сборниках материалов международных и всероссийских конференций и школ-конференций опубликовано 7 работ. Общий объем публикаций – 11,21 а.л., авторский вклад – 8,34 а.л.

В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации.

Наиболее значительные научные работы по теме диссертации, опубликованные в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук:

1. Melnikova N. V. Theoretical investigation of energy and spectrum of carbon nanotubes in the frame of strong related state conception / N. V. Melnikova, **A. I. Murzashev**, T. E. Nazarova, E. O. Shadrin // Synthetic metals. – 2016. – Vol. 220. – P. 292–299. – DOI : 10.1016/j.synthmet.2016.06.024. – 0,89 / 0,59 а.л. (*Web of Science*)

2. Melnikova N. The «rule of multiplicity of three»: does it work in carbon nanotubes? / N. Melnikova, **A. Murzashev**, T. Nazarova, E. Shadrin, A. Ponomarev // Fullerenes, nanotubes and carbon nanostructures. – 2017. – Vol. 25, is. 6. – P. 379–385. – DOI: 10.1080/1536383X.2017.1318380. – 0,93 / 0,76 а.л. (*Web of Science*)

3. **Мурзашев А. И.** Исследование углеродных наносистем в модели Хаббарда / А. И. Мурзашев // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2009. – Т. 135, № 1. – С. 122–133. – 0,85 а.л.

*в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:*

**Murzashev A. I.** A study of carbon nanosystems using the Hubbard model / A. I. Murzashev // Journal of experimental and theoretical physics. – 2009. – Vol. 108, is. 1. – P. 111–120. – DOI: 10.1134/S1063776109010142.

4. **Мурзашев А. И.** Энергетический спектр и спектры оптического поглощения углеродных нанотрубок хиральности (10,10), (11,9), (12,8) /

А. И. Мурзашев, Е. О. Шадрин // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2014. – Т. 145, № 6. – С. 1061–1071. – 0,64 / 0,34 а.л.

*в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:*

**Murzashev A. I.** Energy spectrum and optical absorption spectra of carbon nanotubes with chiralities of (10,10), (11,9), and (12,8) / **A. I. Murzashev**, E. O. Shadrin // Journal of experimental and theoretical physics. – 2014. – Vol. 118, is. 6. – P. 935–944. – DOI: 10.1134/S1063776114050148.

5. **Мурзашев А. И.** Энергетический спектр и оптические свойства фуллерена  $C_{74}$  в рамках модели Хаббарда / А. И. Мурзашев, Т. Э. Назарова // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2014. – Т. 146, № 5. – С. 1026–1034. – 0,64 / 0,34 а.л.

*в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:*

**Murzashev A. I.** Energy spectrum and optical properties of  $C_{74}$  fullerene within the Hubbard model / A. I. Murzashev, T. E. Nazarova // Journal of experimental and theoretical physics. – 2014. – Vol. 146, is. 5. – P. 902–909. – DOI: 10.1134/S106377611411017X.

6. Миронов Г. И. Энергетический спектр фуллерена  $C_{60}$  / Г. И. Миронов, **А. И. Мурзашев** // Физика твердого тела. – 2011. – Т. 53, № 11. – С. 2273–2277. – 0,34 / 0,27 а.л.

*в переводной версии журнала:*

Mironov G. I. Energy spectrum of C-60 fullerene / G. I. Mironov, **A. I. Murzashev** // Physic of the solid state. – 2011. – Vol. 53, is. 11. – P. 2393–2397. – DOI: 10.1134/S1063783411110199. (*Web of Science*).

7. Арутюнова Т. Э. Энергетический спектр и корреляционные функции кластеров углеродных нанотрубок хиральности (5,5) / Т. Э. Арутюнова, Г. И. Миронов, **А. И. Мурзашев** // Физика твердого тела. – 2012. – Т. 54, № 9. – С. 1797–1807. – 0,42 / 0,2 а.л.

*в переводной версии журнала:*

Arutyunova T. E. Energy spectrum and correlation functions of clusters of carbon nanotubes with the (5, 5) chirality/ T. E. Arutyunova, G. I. Mironov, **A. I. Murzashev** //

Physics of the solid state. – 2012. – Vol. 54, is. 9. – P. 1917–1929. – DOI: 10.1134/S106378341209003X (*Web of Science*)

На автореферат поступило 5 положительных отзывов. Отзывы представили:

1. **В. Е. Егорушкин**, д-р физ.-мат. наук, проф., ведущий научный сотрудник лаборатории физики нелинейных сред Института физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, *без замечаний*.
2. **С. Н. Гриняев**, д-р физ.-мат. наук, профессор исследовательской школы физики высокоэнергетических процессов Национального исследовательского Томского политехнического университета, *без замечаний*.
3. **В. Р. Белослудов**, д-р физ.-мат. наук, главный научный сотрудник лаборатории клатратных соединений Института неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН, г. Новосибирск, *без замечаний*.
4. **П. П. Каминский**, д-р физ.-мат. наук, заместитель директора по научной работе Института физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, *с замечанием*: в диссертации не приводится уравнение дальней связи для корреляционных функций в модели Хаббарда, при наличии которого не нужно было бы применять метод функций Грина, и все энергетические и термодинамические характеристики находились бы из решения этого уравнения самосогласованно (автоматически), что качественно повысило бы уровень работы.
5. **И. И. Попов**, д-р физ.-мат. наук, проф., профессор кафедры КиПР Поволжского государственного технологического университета, г. Йошкар-Ола, *с замечанием*: автором не показаны пути прикладного применения полученных научных результатов, тогда как известно, что фуллерены и УНТ практически являются новым базовым материалом для развития наноэлектроники.

В отзывах отмечено, что теоретические работы по исследованию электронного строения таких углеродных наносистем, как нанотрубки и фуллерены, выполненные по данной тематике ранее, основывались на традиционном, зонном подходе, при этом были получены теоретические предсказания, плохо согласующиеся с экспериментальными данными. Актуальность темы исследования связана с необходимостью дальнейших исследований, выходящих за рамки упомянутого подхода. Корректный учет кулоновского отталкивания электронов на узле, не

учитываемый в силу расчетных трудностей другими авторами, но осуществленный в диссертации А. И. Мурзашева, позволил получить новые теоретические результаты, которые существенно повышают точность расчетов электронной структуры исследуемых материалов и дают возможность предсказывать ее зависимость от различных факторов, оценивать значения электронных характеристик, важных при синтезе и практическом применении наноматериалов. А. И. Мурзашевым с использованием метода статического флуктуационного приближения обоснованы 3-мерная модель Изинга, модель Гейзенберга и модель Хаббарда; 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, так и бесконечных размеров; впервые описана перестройка энергетического спектра фуллеренов и УНТ, приводящая 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; дано объяснение свертывания растущей УНТ в фуллерены  $C_{60}$  и  $C_{70}$  вследствие немонотонной зависимости энергии УНТ от числа атомов; проведен анализ теоретических и экспериментальных спектров оптического поглощения, позволивший идентифицировать изомеры фуллеренов и комплексы на их основе. Полученные результаты имеют высокую практическую значимость с точки зрения физической науки, вносят существенные корректировки в понимание и интерпретацию экспериментальных результатов по спектрам оптического поглощения углеродных наноматериалов и могут быть использованы другими специалистами в области наноматериалов, синтезируемых на основе углерода и имеющих сходную  $sp^2$ -гибридизацию.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что **Ю. А. Хон** является известным специалистом в области физики конденсированного состояния, в частности, в области электронной структуры и физических свойств различных материалов; **М. Б. Белоненко** является высококвалифицированным специалистом по теоретическому изучению углеродных наноматериалов, а **А. И. Романенко** широко известен своими экспериментальными исследованиями структуры и свойств этих материалов;



в Омском государственном университете им. Ф. М. Достоевского работают квалифицированные специалисты, известные своими достижениями в области теоретических и экспериментальных исследований углеродных наносистем.

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:**

*разработана* научная концепция для описания углеродных наноматериалов как сильно-коррелированных систем, позволяющая описать качественно новые закономерности в формировании электронной структуры и оптических свойств исследуемых материалов;

*предложены* новые методы расчета энергетического спектра и спектров оптического поглощения для таких углеродных наноматериалов, как фуллерены и эндоэдральные комплексы на их основе, а также бесконечные углеродные нанотрубки и трубки конечного размера, которые позволили реализовать учет сильного кулоновского взаимодействия  $\pi$ -электронов на одном узле, что существенно повысило точность расчетов электронных характеристик исследуемых систем;

*доказано*, что кулоновское взаимодействие  $\pi$ -электронов на одном узле приводит к такой перестройке электронного строения углеродных нанотрубок и фуллеренов, когда все энергетические уровни системы расщепляются на два, один из которых соответствует состояниям  $\pi$ -электронов с однократным занятием узла, и он в основном состоянии является заполненным, второй же, вакантный, соответствует состоянию с двукратным занятием узла этими же электронами. Разбиение энергетического спектра на две зоны, называемые «верхней» и «нижней» хаббардовскими подзонами, приводит к формированию новых типов оптических переходов.

**Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:**

*доказано* утверждение о том, что учет внутриузельного кулоновского взаимодействия  $\pi$ -электронов играет определяющую роль в формировании электронных и оптических свойств фуллеренов и углеродных нанотрубок, вносящее вклад в расширение представлений об изучаемом явлении;

*применительно к проблематике диссертации* результативно использовано приближение статических флуктуаций для модели Хаббарда при построении электронной структуры фуллеренов и углеродных нанотрубок;

*раскрыты* существенные противоречия между экспериментальными данными и результатами ранее проведенных теоретических исследований и предложен подход для снятия этих противоречий, основанный на учете внутриузельного кулоновского взаимодействия  $\pi$ -электронов при построении электронной структуры фуллеренов и УНТ;

*изучены* причинно-следственные связи расщепления электронной структуры на хаббардовские подзоны с возникновением новых оптических переходов в фуллеренах и УНТ;

*проведена* модернизация модели Хаббарда с учетом структурных особенностей фуллеренов и углеродных нанотрубок, обеспечившая получение новых результатов по электронным и оптическим свойствам типичных и вновь синтезированных фуллеренов и углеродных нанотрубок.

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:**

*разработаны и внедрены* новые методы и программы для получения электронных энергетических спектров и спектров оптического поглощения фуллеренов и углеродных нанотрубок, которые позволяют исследовать практически все соединения с  $sp^2$ -гибридизацией;

*определены* эффективные критерии отбора возможных оптических переходов в фуллеренах и эндоэдральных комплексах на их основе, с помощью которых возможно детальное исследование спектров оптического поглощения и идентификация вновь синтезированных фуллеренов;

*представлены* результаты, расширяющие современные представления об электронном строении фуллеренов и углеродных нанотрубок.

**Рекомендации об использовании результатов диссертационного исследования.** Полученные результаты могут быть использованы в научных коллективах, исследующих и синтезирующих углеродные нанотрубки и фуллерены: в Московском государственном университете имени М. В. Ломоносова; Национальном исследовательском центре «Курчатовский институт» (г. Москва), в том числе в Петербургском институте ядерной физики им. П. Б. Константинова; Институте

проблем химической физики РАН (г. Черноголовка); Физико-техническом институте имени А. Ф. Иоффе РАН (г. Санкт-Петербург); Институте неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН (г. Новосибирск); Институте катализа им. Г. К. Борескова СО РАН (г. Новосибирск); Институте физики прочности и материаловедения СО РАН (г. Томск); Национальном исследовательском Томском государственном университете, в том числе в Сибирском физико-техническом институте имени академика В. Д. Кузнецова; Марийском государственном университете (г. Йошкар-Ола) и в других образовательных и научных учреждениях.

**Оценка достоверности результатов исследования выявила:**

*идея базируется* на общеизвестном факте о том, что внутриузельное кулоновское взаимодействие электронов в ряде случаев приводит к переходу металл-диэлектрик, который был объяснен в рамках модели Хаббарда, а также на факте, что в углеродных системах с  $sp^2$ -гибридизацией, к каковым относятся фуллерены и углеродные нанотрубки, такое взаимодействие велико и достигает значений порядка 10 эВ;

*использованы* хорошо апробированные методы квантовой теории поля с использованием метода функций Грина;

*установлено* качественное согласие результатов диссертационной работы с соответствующими экспериментальными данными, представленными в многочисленных источниках.

**Научная новизна** результатов исследования заключается в том, что в нем разработаны методы и теоретические положения, которые необходимо использовать при изучении электронной структуры и физических свойств фуллеренов и УНТ и их синтезе. Совокупность полученных в диссертации результатов позволила выявить физические механизмы, определяющие уникальные свойства исследуемых материалов. Исследование проведено с учетом сильного внутриузельного кулоновского взаимодействия, поскольку фуллерены и УНТ следует рассматривать как сильно коррелированные системы. Полученные результаты позволили снять ряд противоречий в области изучения электронных и оптических свойств фуллеренов и УНТ, появившихся за последние десятилетия.

**Личный вклад соискателя состоит в:** непосредственном участии в постановке цели и задач исследования, анализе и обсуждении результатов, формулировке научных положений, выносимых на защиту, подготовке публикаций по теме исследования. Все результаты, вошедшие в диссертацию, получены автором лично, как в индивидуальных, так и в коллективных исследованиях.

Диссертация отвечает критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней для диссертаций на соискание ученой степени доктора наук, и, в соответствии с пунктом 9 Положения, является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований разработаны теоретические положения, дополняющие теорию электронного строения углеродных наноматериалов в части построения и анализа электронных и оптических свойств углеродных нанотрубок и фуллеренов с учетом сильного внутриузельного кулоновского взаимодействия  $\pi$ -электронов на одном узле, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение в области физики конденсированного состояния.

На заседании 25.10.2018 диссертационный совет принял решение присудить **Мурзашеву А. И.** ученую степень доктора физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 7 докторов наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании, из 24 человек, входящих в состав совета, проголосовал: за – 18, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель

диссертационного совета

Багров Владислав Гавриилович

Ученый секретарь

диссертационного совета

Киреева Ирина Васильевна

25.10.2018

