

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Назаровой Татьяны Эдуардовны
«Электронное строение и оптические свойства углеродных нанотрубок и
фуллеренов как систем с сильными корреляциями»
на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук по специальности
01.04.07 – физика конденсированного состояния

Диссертация Назаровой Татьяны Эдуардовны посвящена теоретическому исследованию энергетического спектра фуллеренов и кластеров углеродных нанотрубок (УНТ), обладающих уникальными оптическими и электропроводящими свойствами. Чувствительность этих материалов к внешнему воздействию и их необычные оптические и электропроводящие свойства определяют огромные перспективы для их использования в области микроэлектроники. Теоретическим исследованием электронной структуры фуллеренов и УНТ занимаются в настоящее время во многих научных центрах. Отличительной особенностью данного исследования является учет кулоновского взаимодействия, которое в этих системах достигает величины ~ 10 эВ.

В данной работе проведены расчеты электронных энергетических спектров фуллеренов и УНТ с учетом сильного кулоновского взаимодействия электронов на одном узле. Расчеты выполнены с помощью методов теории поля в статистической физике в рамках модели Хаббарда, которая многие годы успешно используется для описания сильно коррелированных систем.

В работе получен энергетический спектр фуллеренов C_{72} и C_{74} и на его основе – спектр оптического поглощения, который хорошо согласуется с соответствующими экспериментальными данными. Также вычислены энергетические спектры кластеров УНТ различной длины (30, 50, 70, 90 и 190 атомов). Для кластера, состоящего из 30 атомов, вычислены средние значения чисел заполнения узлов решетки. Показано, что в случае, когда число электронов равно числу узлов, эти средние значения на неэквивалентных узлах одинаковы, а в случае, когда число электронов не равно числу узлов – разные. Проведенный анализ энергетического спектра указанных кластеров УНТ показал, что по своим электропроводящим свойствам исследованные нанотрубки являются полупроводниками с щелью ~ 1 эВ.

В работе проанализирован характер изменения основных параметров электронной структуры УНТ хиральности (5,5), таких, как ширина хаббардовских подзон, щель между занятыми и вакантными уровнями, корреляционные функции и средняя энергия, приходящаяся на один атом, с изменением количества атомов в кластере. Показано, что зависимость средней энергии, приходящейся на атом, от числа атомов в кластере имеет

максимум в области $\sim 60\text{--}70$ атомов. Это позволило автору предположить, что в процессе роста УНТ кластеры, состоящие из $60\text{--}70$ атомов, могут с равной вероятностью образовать фуллерены C_{60} или продолжать расти дальше – до трубок, имеющих макроскопическую длину. Если же в этот момент прекратить подвод к системе энергии, то кластеры УНТ указанных размеров релаксируют, образуя фуллерены C_{60} . При непрерывном подводе энергии УНТ будут расти практически бесконечно долго, пока растущая трубка не встретит препятствие, что наблюдается и в экспериментальных исследованиях.

Автореферат дает полное представление о диссертации, результаты которой опубликованы как в периодической научной литературе, так и апробированы на различных российских и международных конференциях и школах.

Диссертационная работа Назаровой Т.Э. «Электронное строение и оптические свойства углеродных нанотрубок и фуллеренов как систем с сильными корреляциями» представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, которая соответствует всем требованиям и критериям, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата наук, установленных в пункте 9 «Положение о порядке присуждения ученых степеней», утвержденных постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года №842, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

доцент кафедры современных специальных материалов
федерального государственного бюджетного образовательного
учреждения высшего образования
«Алтайский государственный технический
университет им. И.И. Ползунова»
656038, г. Барнаул, пр. Ленина, 46
altgtu@list.ru; <http://www.altstu.ru>
кандидат физико-математических наук, доцент

«05» октября 2017 г.

Подпись А.В. Попова заверяю
специалист по кадрам
Коваленко Тамара Николаевна



Попов Андрей Валерьевич

(3852) 29-08-96