

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»

В диссертации Назаровой Татьяны Эдуардовны проведено теоретическое исследование роли сильно коррелированных электронных состояний в формировании механизма и характера перестройки электронной структуры фуллеренов C_{72} , C_{74} и кластеров углеродной нанотрубки (УНТ) хиральности (5,5). В последнее десятилетие активно изучаются теоретически и экспериментально атомная и электронная структура, а также свойства фуллеренов и УНТ. Они являются весьма перспективными материалами для энергетики, медицины, биологии и нанoeлектроники, обладая уникальными оптическими, электро- и теплопроводящими свойствами.

В своем исследовании диссертантка продемонстрировала, что для описания электронных свойств систем с сильным кулоновским взаимодействием элегантно и успешно могут быть использованы методы квантовой теории поля, а также приближение статических флуктуаций для модели Хаббарда и приближение молекулярных орбиталей. Показано, что сильное кулоновское взаимодействие π -электронов на одном узле расщепляет энергетический спектр на две хаббардовские подзоны и формирует щель в энергетическом спектре. Полученные данные о наличии щели шириной ~ 1 эВ позволили автору утверждать, что УНТ хиральности (5,5), в противоречие общепринятому «правилу кратности трем», является полупроводником, а не металлом.

Перестройка электронной структуры играет существенную роль в формировании оптических свойств фуллеренов C_{72} и C_{74} и эндодральных комплексов на их основе. На основе полученных в диссертации результатов оказывается возможной идентификация вновь выделенных фуллеренов. Также в работе исследованы основные параметры электронной структуры кластеров УНТ хиральности (5,5): ширина хаббардовских подзон, щель между занятыми и вакантными уровнями, корреляционные функции и средняя энергия, приходящаяся на один атом, и их зависимость от количества атомов в кластере. Получен очень интересный результат, показывающий, что в процессе синтеза нанотрубки возникает конкурентный рост между УНТ и свертыванием растущих кластеров в фуллерены при достижении 60-70 атомов углерода, что подтверждается экспериментальными данными.

Полученные в диссертации новые физические представления о природе электронного строения и свойств углеродных наноструктур позволяют существенно повысить точность расчетов электронных характеристик углеродных наноматериалов.

Результаты, выносимые на защиту, подтверждаются физической обоснованностью, применением хорошо проверенных современных методов расчета, а также качественным согласием полученных результатов с соответствующими экспериментальными данными. Автореферат дает достаточно полное представление о содержании диссертации. Основные результаты опубликованы в рецензируемых журналах, рекомендуемых ВАК, а также

представлены на различных российских и международных конференциях. В автореферате последовательно и логично изложен материал, позволяющий получить достаточно полное представление о работе.

Считаю, что диссертационная работа Назаровой Татьяны Эдуардовны «Электронное строение и оптические свойства углеродных нанотрубок и фуллеренов как систем с сильными корреляциями» является завершённой научно-квалификационной работой, которая по объёму выполненных исследований, их актуальности и новизне результатов отвечает всем требованиям, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата наук, установленным пунктом 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842, а ее автор, Назарова Татьяна Эдуардовна, заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Профессор кафедры высшей математики и математической физики
Федерального государственного автономного образовательного учреждения
высшего образования «Национальный исследовательский Томский
политехнический университет», доктор физико-математических наук (01.04.02
– «Теоретическая физика»)  **Килин Виктор Андреевич**

13 октября 2017 г.

Подпись Килина В.А. удостоверено

Учёный секретарь
Учёного совета НИ ТПУ




Ананьева Ольга Афанасьевна

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», адрес: Россия, 634050, г. Томск, проспект Ленина, дом 30; телефон: +7(3822) 60-63-33. E-mail: tpu@tpu.ru; адрес сайта: <https://tpu.ru>