

## ОТЗЫВ

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

Диссертационная работа Назаровой Т.Э. посвящена одной из достаточно молодых, но бурно развивающейся и перспективной как в теоретическом, так и в практическом плане областей - физике углеродных наноструктур. Представлены расчеты энергетических спектров фуллеренов  $C_{72}$ ,  $C_{74}$  и углеродных нанотрубок (УНТ) хиральности (5,5) с учетом сильного ( $\sim 10$  эВ) кулоновского взаимодействия  $\pi$ -электронов. Автору удалось выполнить вычисления энергетических спектров выбранных систем в рамках модели Хаббарда, которая позволяет корректно учесть влияние кулоновского взаимодействия на электронную структуру конденсированных систем. Таким образом, актуальность и практическая значимость результатов настоящей работы не вызывает сомнения.

Расчет энергетических спектров фуллеренов  $C_{72}$  и  $C_{74}$ , выполненный в приближении статических флуктуаций для модели Хаббарда, позволил уточнить некоторые особенности электронного строения. Так, в частности, считалось, что щель между верхней заполненной молекулярной орбиталью (ВЗМО) и нижней вакантной молекулярной орбиталью (НВМО) в фуллерене  $C_{74}$  мало  $\sim 0.01$  эВ. Результаты расчетов энергетических спектров этих систем показали, что кулоновское взаимодействие существенным образом перестраивает их энергетические спектры. В этом случае энергетические спектры разбиваются на две группы уровней – хаббардовские подзоны, верхнюю и нижнюю. Щель ВЗМО – НВМО в этом случае определяется расстоянием между верхним уровнем нижней хаббардовской подзоны и нижним уровнем верхней хаббардовской подзоны. И значение величины этой щели оказывается типичным для всех фуллеренов  $\sim 1.27$  эВ. Спектры оптического поглощения эндодральных комплексов фуллеренов  $C_{72}$  и  $C_{74}$ , смоделированные в рассматриваемой работе на основании энергетических спектров, вычисленных в рамках модели Хаббарда, на удовлетворительном качественном уровне совпадают с экспериментальными данными. Это свидетельствует о применимости подхода, развиваемого Назаровой Т.Э., к исследованию электронного строения углеродных кластеров.

Научный интерес представляют и результаты, полученные в диссертационной работе Назаровой Т.Э, касающиеся УНТ хиральности (5,5). УНТ такой хиральности согласно результатам группы Дресслхауз, по типу проводимости должны быть металлами. Но анализ параметров энергетического спектра УНТ в зависимости от числа атомов, показал, что щель в энергетическом спектре стремится к конечному значению  $\sim 1$  эВ. Это говорит о том, что УНТ хиральности (5,5) по типу проводимости являются полупроводниками. Этот вывод подтверждает и анализ экспериментальных данных.

Работа выполнена на хорошем научном уровне. Судя по автореферату, автор в достаточной степени владеет методами теоретической физики в приложении к физике конденсированного состояния.

Отмечая высокий уровень работы, нельзя не отметить и недостатки. Автор утверждает, что расчетные спектры оптического поглощения эндодральных комплексов хорошо совпадают с экспериментальными. Хотелось бы понять, что

значит, хорошее совпадение? Если визуально хорошего согласия не наблюдается (Рис. 2 и 3 автореферата).

Диссертационная работа Назаровой Татьяны Эдуардовны «Электронное строение и оптические свойства углеродных нанотрубок и фуллеренов как систем с сильными корреляциями» представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, 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 автор, Назарова Татьяна Эдуардовна, заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Заведующий лабораторией молекулярных проводников и магнетиков ИПХФ РАН,  
кандидат химических наук  
(02.00.04 – «Физическая химия»)  
05 октября 2017 г.

 Кареев Иван Евгеньевич

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химической физики Российской академии наук, адрес: 142432, Московская область, Ногинский район, г. Черноголовка, проспект академика Семенова, 1; телефон: +7 (495) 993-57-07; E-mail: [director@icp.ac.ru](mailto:director@icp.ac.ru); адрес сайта: <http://www.icp.ac.ru>

Подпись Кареева И.Е. удостоверяю

Ученый секретарь ИПХФ РАН,  
доктор химических наук  
05 октября 2017 г.





Психа Борис Львович