

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 влияния сильно коррелированных электронных состояний на механизм и характер перестройки электронной структуры фуллеренов C_{72} и C_{74} , а также кластеров углеродной нанотрубки (УНТ) хиральности (5,5). Изучаемые материалы, благодаря их оптическим, электро- и теплопроводящим свойствам, можно применять в таких областях, как медицина, биология, энергетика и других. Поэтому в последнее десятилетие проводится огромное число как теоретических, так и экспериментальных исследований структуры и свойств фуллеренов и УНТ, в частности, их электронной структуры.

Для проведения исследования в защищаемой работе были использованы методы квантовой теории поля и приближение статических флуктуаций для модели Хаббарда. Для описания спектров оптического поглощения фуллеренов использовалось приближение молекулярных орбиталей. В данной диссертации продемонстрировано, что перечисленные методы могут быть успешно применены при изучении электронных свойств систем с сильными корреляциями, к которым, несомненно, относятся исследуемые системы.

В настоящей работе изучено влияние сильно коррелированных электронных состояний на механизм и характер перестройки электронной структуры фуллеренов C_{72} и C_{74} , а также кластеров углеродной нанотрубки хиральности (5,5), состоящих из различного числа атомов (30, 50, 70, 90 и 190). Исследована роль сильного кулоновского взаимодействия в формировании оптических свойств фуллеренов C_{72} и C_{74} и проанализирован характер изменения основных параметров электронной структуры кластеров 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 них.

Получен ряд важных теоретических результатов, которые хорошо согласуются с экспериментальными данными, например, рассчитанные на основе энергетических спектров спектры оптического поглощения фуллеренов C_{72} и C_{74} . Проведено исследование энергетических спектров кластеров УНТ различной длины (30, 50, 70, 90 и 190 атомов). Показано, что в процессе синтеза при числе атомов углерода 60–70 возникает конкурентный рост между УНТ и свертыванием растущих кластеров в фуллерены, что также подтверждается экспериментальными данными.

Проведен анализ зависимости щели между нижней и верхней хаббардовскими подзонами и шириной хаббардовской подзоны. Полученные данные о наличии щели шириной ~ 1 эВ позволяют утверждать, что УНТ

хиральности (5,5), в противоречие «правилу кратности трем», является полупроводником.

Результаты, выносимые на защиту, подтверждаются физической обоснованностью, применением современных оригинальных методов расчета, а также хорошим качественным согласием полученных результатов с имеющимися в литературе экспериментальными данными. Автореферат дает полное представление о диссертации, основные результаты которой опубликованы в рецензируемых журналах, рекомендуемых ВАК, а также представлены на различных российских и международных конференциях.

В автореферате материал изложен последовательно, логично и аргументированно, что позволяет получить полное представление о данной работе.

Диссертационная работа Назаровой Татьяны Эдуардовны «Электронное строение и оптические свойства углеродных нанотрубок и фуллеренов как систем с сильными корреляциями» представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая по объему 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».

Младший научный сотрудник
лаборатории физики нелинейных сред
ИФПМ СО РАН,
кандидат физико-математических наук
(01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»)

Н.Г. Бобенко

Бобенко Надежда Георгиевна

05.10.2017

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, адрес: 634055, г. Томск, просп. Академический, 2/4; телефон: +7 (3822) 49-18-81; E-mail: root@ispms.tomsk.ru; адрес сайта: <http://www.ispms.ru>

Подпись Бобенко Н.Г. удостоверяю
Ученый секретарь ИФПМ СО РАН,
кандидат физико-математических наук



Матолыгина Наталья Юрьевна