

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»

Диссертационная работа Назаровой Татьяны Эдуардовны «Электронное строение и оптические свойства углеродных нанотрубок и фуллеренов как систем с сильными корреляциями» посвящена исследованию электронного энергетического спектра кластеров углеродных нанотрубок хиральности (5,5) и фуллеренов C_{72} и C_{74} в рамках модели Хаббарда, т.е. с учетом сильного кулоновского отталкивания электронов на узле.

Актуальность работы определяется тем, что эти материалы имеют реальное практическое применение в различных приложениях. Фуллерены используются в медицине и биологии. Также эти материалы являются перспективными для энергетики. Нанотрубки, в свою очередь нашли применение в полевых эмиссионных дисплеях, гибких транзисторах, прозрачных электродах и др. На данный момент накоплен обширный экспериментальный и теоретический материал по этим системам, касающийся электронного строения данных систем. Теоретические работы, выполненные ранее, основывались на традиционном зонном подходе. Известно, что ряд теоретических предсказаний плохо согласуется с экспериментом, и требуются дальнейшие исследования, выходящие за рамки упомянутого подхода. По этим причинам теоретическое исследование электронной-энергетической структуры фуллеренов и углеродных нанотрубок в подходе Хаббарда и сравнение полученных результатов с данными эксперимента может представлять большой интерес.

Диссертационная работа содержит результаты расчета энергетического спектра и спектра оптического поглощения кластеров углеродных нанотрубок хиральности (5,5) и фуллеренов C_{72} и C_{74} модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций. Необходимость использования данной модели для исследования спектров данных систем обусловлена тем, что результаты, полученные без учета одноузельного отталкивания, противоречат известным экспериментальным данным. Использованный для нахождения спектра метод статических флуктуаций на мой взгляд является близким к методу Хартри-Фока для модели Хаббарда. Функции Грина вычислялись с помощью стандартных методов квантовой теории поля, используемых в статфизике. Для численных расчетов использовался хорошо известный пакет Maple.

В работе получены результаты по расчету энергетического спектра, плотности состояний кластеров углеродных нанотрубок хиральности (5,5) и фуллеренов C_{72} и C_{74} . Параметрами модели являются величины интеграла перескока между узлами и кулоновское отталкивание на узле. Величина последнего, использованная в расчетах, примерно на порядок больше интеграла перескока. Это приводит к тому, что система во всех рассмотренных случаях оказывается изолятором.

В работе получены спектры оптического поглощения ряда металлофуллеренов. Достигнуто неплохое в целом для модельного расчета согласие с имеющимися экспериментальными данными.

Результаты, выносимые на защиту, подтверждаются физической обоснованностью, применением хорошо проверенных и современных методов расчета, а также качественным согласием полученных результатов с соответствующими экспериментальными данными. Автореферат дает полное представление о диссертации, основные результаты которой опубликованы в рецензируемых журналах, рекомендуемых ВАК, а также представлены на различных российских конференциях. В автореферате последовательно и логично изложен материал, позволяющий 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 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».

Старший научный сотрудник
лаборатории теории твердого тела
института физики Тартуского университета,
доктор философии по физике (PhD in Physics)



Рубин Павел Эммануилович
rubin@fi.ut.ee

18.10.2017

Тартуский университет
50090, Tartu, Estonia, Ülikooli 18; +372 737 5100; info@ut.ee; www.ut.ee

Институт физики Тартуского университета
50411, Tartu, Estonia, W. Ostwaldi tn, 1; +372 737 4754; dir@fi.ut.ee; www.fi.ut.ee

Подпись Рубина П. Э. удостоверяю

Секретарь ректора
Тартуского университета



Э. Лембер