

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертацию Назаровой Татьяны Эдуардовны

«Электронное строение и оптические свойства углеродных нанотрубок и фуллеренов

как систем с сильными корреляциями»,

представленную на соискание ученой степени кандидата

физико-математических наук по специальности

01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»

Фуллерены, углеродные нанотрубки (УНТ) благодаря своим уникальным свойствам являются теми объектами, которые интенсивно изучаются в последнее время. Тем не менее, многие вопросы, в частности, связанные с оптическими спектрами, остаются не выясненными. Поэтому изучение свойств указанных объектов является **актуальным**. Уникальность свойств фуллеренов и УНТ во многом обусловлена тем, что в них углерод находится в sp^2 -гибридизированном состоянии, а π -электроны локализованы на узлах. Эти системы характеризуются сильным одноузельным кулоновским взаимодействием, достигающим 10 эВ. Энергетический спектр фуллерена C_{60} был вычислен еще в 1973 г., до его открытия, а энергетический спектр УНТ - в 1992 году. Расчеты, как для фуллеренов, так и для УНТ в то время были выполнены в рамках самого простого приближения в рамках модели сильной связи - хюккелевского приближения. Это приближение хорошо описывает главные особенности электронного строения систем, в которых носители тока сильно локализованы. Но сильным одноузельным кулоновским взаимодействием в хюккелевском приближении всегда пренебрегают. Энергетические спектры фуллеренов и УНТ следует вычислять с учетом кулоновского взаимодействия π -электронов. Одной из моделей, в рамках которой это можно сделать, является модель Хаббарда. Исследованию энергетического спектра фуллеренов и УНТ с учетом сильного кулоновского взаимодействия посвящена диссертационная работа Т.Э. Назаровой. В работе вычислены энергетические спектры фуллеренов C_{72} , C_{74} и кластеров УНТ хиральности (5,5).

Диссертационная работа состоит из введения, основной части, изложенной в трех главах, заключения, списка литературы и одного приложения. Работа изложена на 121 странице и содержит 42 рисунка. Список цитируемой литературы включает 104 источника.

Во введении обоснована актуальность исследования, охарактеризована степень разработанности темы, сформулированы цель и задачи работы, оценена научная новизна полученных результатов, показана их теоретическая и практическая ценность, описана методология и методы исследования, сформулированы положения, выносимые на защиту.

Первая глава диссертации носит обзорный характер и посвящена структуре фуллеренов и УНТ, их электронному строению и оптическим свойствам. На основе результатов теоретических и экспериментальных исследований сделан вывод о необходимости изучения фуллеренов и УНТ в рамках модели Хаббарда как наиболее адекватной модели. Изложены приближенные методы расчетов энергетического спектра в рамках этой модели. Основное внимание акцентировано на приближении статических флуктуаций, обоснована применимость этого приближения для фуллеренов и УНТ.

Во второй главе изложена методика расчета энергетических спектров фуллеренов C_{72} и C_{74} в приближении статических флуктуаций в рамках модели Хаббарда, представлены результаты проведенных вычислений и анализ полученных энергетических спектров. Показано, что величина энергетической щели между вакантными и занятыми состояниями в исследуемых фуллеренах, рассчитанная с учетом кулоновского взаимодействия, оказывается намного больше значения, получаемого без его учета. На основе полученного энергетического спектра фуллеренов C_{72} и C_{74} вычислен их спектр оптического поглощения, который не удастся сравнить с соответствующими экспериментальными данными, поскольку фуллерены C_{72} и C_{74} в чистом виде не существуют. Поэтому автором предложено смоделировать спектр оптического поглощения эндоэдральных комплексов на их основе: $Ca@C_{72}$ и $M@C_{74}$, где М атом металла Eu, Sc, Ca, Yb и Ba. Проведенное сравнение полученных кривых с экспериментальными данными говорит о хорошем качественном их согласии и позволяет сделать вывод о том, что в системах $Eu@C_{74}$, $Sc@C_{74}$, $Ca@C_{74}$, $Yb@C_{74}$ и $Ba@C_{74}$ перенос заряда равен двум электронам.

В третьей главе исследуются кластеры УНТ, состоящие из конечного числа атомов: 30, 50, 70, 90 и 190 - вычислены их энергетические спектры и корреляционные функции. Для кластера, состоящего из 30 атомов, получено распределение избыточных электронов по каркасу кластера. Показано, что «избыток» или «недостаток» заряда стремится распределиться преимущественно на концах трубки. Также проанализировано изменение ширины хаббардовских подзон, щели между ними и значения параметра кулоновского отталкивания, при котором корреляционная функция обращается в нуль, в зависимости от количества атомов в кластере. На основе этого анализа сделан вывод о том, что бесконечные УНТ хиральности (5,5) по типу проводимости должны быть полупроводниками с шириной щелью ~ 1 эВ. Этот результат не подтверждает сформулированное ранее другими авторами правило кратности трем, согласно которому эти трубки должны быть металлическими.

Исследуя зависимость средней энергии, приходящейся на атом, от числа атомов в кластере делается вывод о том, что имеется критический размер кластера (60-70 атомов), при котором кластеру УНТ хиральности (5,5) в равновесных условиях энергетически выгодно свернуться в фуллерен. Однако при непрерывном подводе энергии УНТ будет расти до тех пор, пока не встретит препятствие, что и наблюдается экспериментально.

Результаты, выносимые на защиту, являются новыми, математически обоснованными и физически мотивированными. Сомнений в их достоверности нет.

К диссертации имеются два замечания:

1. В первой главе упоминаются работы, в которых проводились расчеты методом функционала плотности. Но этот метод предназначен для расчета характеристик основного состояния. Этот момент в работе не обсуждается.

2. Фуллерены C_{72} и C_{74} в чистом виде не существуют. Поэтому для сравнения с экспериментом берутся эндоэдральные комплексы $Ca@C_{72}$ и $M@C_{74}$. Сами же спектры этих комплексов не рассчитываются, а моделируются. Естественно возникает вопрос о корректности такого моделирования. Логично было бы вместо расчета энергетического спектра УНТ провести расчет такого спектра хотя бы для одного комплекса и сравнить его со смоделированным.

Указанные недостатки существенно не влияют на научное содержание диссертации и не меняют ее высокой оценки.

Назарова Т.Э. продемонстрировала хорошее знание физики конденсированного состояния, уверенное владение аппаратом теоретической физики при решении задач физики конденсированного состояния. В целом диссертация представляет собой законченное исследование, которое выполнено на хорошем уровне. Результаты диссертации опубликованы в российских и зарубежных журналах, рекомендованных ВАК, и включенных в Web of Science, они также докладывались на всероссийских и международных конференциях и школах. Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

Полученные результаты можно рекомендовать для использования в научных коллективах, исследующих или синтезирующих фуллерены и УНТ: Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Институт проблем химической физики РАН, Петербургский институт ядерной физики им. П.Б. Константинова РАН, ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Институт неорганической химии СО РАН, Институт катализа СО РАН, Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Сибирский физико-технический институт им. академика В.Д. Кузнецова при Томском государственном университете, а также другие научно-исследовательские организации и учреждения.

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, соответствующую всем требованиям и критериям, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, установленным в пункте 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842. Её автор – Назарова Т. Э. заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Официальный оппонент

заведующий лабораторией физики

нелинейных сред ИФПМ СО РАН,

доктор физико-математических наук

(01.04.07 – «Физика конденсированного

состояния»), профессор

Хон Юрий Андреевич

05 октября 2017 г.

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 Хона Юрия Андреевича удостоверяю

Ученый секретарь ИФПМ СО РАН

кандидат физико-математических наук

Матолыгина Наталья Юрьевна