

СВЕДЕНИЯ О РЕЗУЛЬТАТАХ ПУБЛИЧНОЙ ЗАЩИТЫ ДИССЕРТАЦИИ

Диссертационный совет Д 212.267.07, созданный на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», извещает о результатах состоявшейся 26 октября 2017 года публичной защиты диссертации Назаровой Татьяны Эдуардовны «Электронное строение и оптические свойства углеродных нанотрубок и фуллеренов как систем с сильными корреляциями» по специальности 01.04.07– Физика конденсированного состояния на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

Присутствовали 17 из 24 членов диссертационного совета, из них 7 докторов наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния:

1. Ивонин И.В., заместитель председателя диссертационного совета	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
2. Киреева И.В., ученый секретарь диссертационного совета	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
3. Бордовицын В.А.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
4. Брудный В.Н.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
5. Бухбиндер И.Л.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
6. Войцеховский А.В.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
7. Давыдов В.Н.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
8. Дударев Е.Ф.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
9. Коротаев А.Д.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
10. Ляхович С.Л.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
11. Мельникова Н.В.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
12. Потекаев А.И.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
13. Старенченко В.А.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
14. Трифонов А.Ю.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
15. Тюменцев А.Н.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
16. Шаповалов А.В.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
17. Шарапов А.А.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02

В связи с невозможностью присутствия на заседании председателя диссертационного совета доктора физико-математических наук, профессора Багрова Владислава Гавриловича по его письменному поручению заседание провел заместитель председателя диссертационного совета, доктор физико-математических наук Ивонин Иван Варфоломеевич.

По результатам защиты диссертации тайным голосованием (результаты голосования: за присуждение ученой степени – 17, против – нет, недействительных бюллетеней – нет) диссертационный совет принял решение присудить Т.Э. Назаровой ученую степень кандидата физико-математических наук.

Заключение диссертационного совета Д 212.267.07
на базе федерального государственного автономного образовательного
учреждения высшего образования
«Национальный исследовательский Томский государственный университет»
Министерства образования и науки Российской Федерации
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук
аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 26.10.2017, № 71

О присуждении **Назаровой Татьяне Эдуардовне**, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация **«Электронное строение и оптические свойства углеродных нанотрубок и фуллеренов как систем с сильными корреляциями»** по специальности **01.04.07** – Физика конденсированного состояния, принята к защите 25.05.2017, протокол № 64, диссертационным советом Д 212.267.07 на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации (634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, приказ о создании диссертационного совета № 105/нк от 11.04.2012).

Соискатель **Назарова Татьяна Эдуардовна**, 1988 года рождения.

В 2010 году соискатель окончила государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Марийский государственный университет».

В 2013 году соискатель очно окончила аспирантуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Марийский государственный университет».

Для подготовки диссертации с 15.10.2016 прикреплена к федеральному государственному автономному образовательному учреждению высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

Работает в должности учителя физики в Муниципальном автономном образовательном учреждении «Средняя общеобразовательная школа № 30 г. Йошкар-Олы», по совместительству – в должности инженера-исследователя лаборатории новых материалов и перспективных технологий Сибирского физико-технического института имени академика В.Д. Кузнецова в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации.

Диссертация выполнена на кафедре физики металлов физического факультета и в лаборатории новых материалов и перспективных технологий Сибирского физико-технического института имени академика В.Д. Кузнецова федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации.

Научные руководители:

кандидат физико-математических наук, **Мурзашев Аркадий Ислибаевич**, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Марийский государственный университет», кафедра физики и методики обучения физике, доцент; по совместительству до 31.12.2016 – федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», лаборатория новых материалов и перспективных технологий Сибирского физико-технического института имени академика В.Д. Кузнецова, старший научный сотрудник;

доктор физико-математических наук, **Мельникова Наталия Васильевна**, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», лаборатория новых материалов и перспективных технологий Сибирского физико-технического института имени академика В.Д. Кузнецова. старший научный сотрудник.

Официальные оппоненты:

Дзедисашвили Дмитрий Михайлович, доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук», лаборатория теоретической физики обособленного подразделения – Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики им. Л.Н. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук, ведущий научный сотрудник

Хон Юрий Андреевич, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, лаборатория физики нелинейных сред, заведующий лабораторией

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «**Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского**», г. Омск, в своём положительном отзыве, подписанном **Прудниковым Павлом Владимировичем** (доктор физико-математических наук, профессор, кафедра теоретической физики, профессор), указала, что физические основы свойств фуллеренов и углеродных нанотрубок (УНТ) изучаются в настоящее время во многих ведущих научных центрах мира, и тот факт, что в фуллеренах и УНТ как системах с sp^2 гибридизацией одноузельное кулоновское взаимодействие велико, требует пересмотра результатов ранних работ, в которых энергетические спектры фуллеренов и УНТ были вычислены без учета кулоновского взаимодействия π -электронов, в связи с чем диссертационная работа Т.Э. Назаровой является актуальной. Автором рассмотрена структура фуллеренов и УНТ, их электронное строение и оптические свойства; в рамках модели Хаббарда вычислены энергетические спектры фуллеренов C_{72} , C_{74} и кластеров УНТ хиральности (5,5); объяснена причина того, что величина энергетической щели между вакантными и занятыми состояниями в фуллерене C_{74} при учете кулоновского взаимодействия оказывается намного больше значения, получаемого без учета этого взаимодействия; смоделирован

спектр оптического поглощения эндодральных комплексов фуллеренов $\text{Ca}@C_{72}$ и $\text{M}@C_{74}$, где М – атом металла Eu, Sc, Ca, Yb и Ba; показано хорошее качественное согласие полученных теоретических результатов с экспериментальными данными; сделан вывод о том, что в системах $\text{Eu}@C_{74}$, $\text{Sc}@C_{74}$, $\text{Ca}@C_{74}$, $\text{Yb}@C_{74}$ и $\text{Ba}@C_{74}$ перенос заряда равен двум электронам; получены энергетические спектры и корреляционные функции для кластеров УНТ, состоящих из различного числа атомов; исследована зависимость средней энергии на атом от числа атомов в кластере; сделан вывод о том, что имеется критический размер кластера, равный примерно 60 атомам, при котором системе, представляющей собой кластер УНТ хиральности (5,5), в равновесных условиях энергетически выгодно «схлопнуться» в фуллерен, состоящий из 60–70 атомов. Полученные результаты могут быть рекомендованы к использованию в научных коллективах, работающих в области моделирования, синтеза и исследования фуллеренов и УНТ и создания на их основе электронных устройств.

Соискатель имеет 11 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации – 11 работ, опубликованных в рецензируемых научных изданиях – 4 (из них 3 статьи в российских журналах, переводные версии которых индексируются Web of Science, 1 статья в зарубежном издании, индексируемом Web of Science) и 7 публикаций в сборниках материалов международных и всероссийских научных конференций. Общий объем публикаций – 4,04 п.л., авторский вклад – 2,02 п.л.

В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации.

Наиболее значительные научные работы по теме диссертации, опубликованные в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук:

1. **Аругюнова (Назарова) Т. Э.** Энергетический спектр и корреляционные функции кластеров углеродных нанотрубок хиральности (5,5) / Т. Э. Аругюнова (Назарова), Г. И. Миронов, А. И. Мурзашев // Физика твердого тела. – 2012. – Т. 54, вып. 9. – С. 1797–1807. – 0,42 / 0,2 п.л.

в переводной версии журнала:

Arutyunova (Nazarova) T. E. Energy spectrum and correlation functions of clusters of carbon nanotubes with the (5, 5) chirality / T. E. Arutyunova (Nazarova), G. I. Mironov, A. I. Murzashev // *Physics of the Solid State*. – 2012. – Vol. 54, is. 9. – P. 1917–1929. – DOI: 10.1134/S106378341209003X

2. Мурзашев А. И. Энергетический спектр и спектр оптического поглощения эндоэдрального фуллерена Ca@C₇₂ / А. И. Мурзашев, **Т. Э. Назарова** // *Физика металлов и металловедение*. – 2014. – Т. 115, № 7. – С. 675–681. – 0,38 / 0,2 п.л.

в переводной версии журнала:

Murzashev A. I. Energy spectrum and spectrum of optical absorption of endohedral fullerene Ca@C₇₂ / A. I. Murzashev, **T. E. Nazarova** // *The Physics of Metals and Metallography*. – 2014. – Vol. 115, is. 7. – P. 635–641. – DOI: 10.1134/S0031918X14040103

3. Мурзашев А. И. Энергетический спектр и оптические свойства фуллерена C₇₄ в рамках модели Хаббарда / А. И. Мурзашев, **Т. Э. Назарова** // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. – 2014. – Т. 146, № 5. – С. 1026–1034. – 0,64 / 0,3 п.л.

в переводной версии журнала:

Murzashev A. I. Energy spectrum and optical properties of C₇₄ fullerene with in the Hubbard model / A. I. Murzashev, **T. I. Nazarova** // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. – 2014. – Vol. 146, is. 5. – P. 902–909. – DOI: 10.1134/S106377611411017X

4. Melnikova N. V. Theoretical investigation of energy spectrum of carbon nanotubes in the frame of strong related state conception / N. V. Melnikova, A. I. Murzashev, **T. E. Nazarova**, E. O. Shadrin // *Synthetic Metals*. – 2016. – Vol. 220. – P. 292–299. – DOI : 10.1016/j.synthmet.2016.06.024. – 0,89 / 0,3 п.л.

На автореферат поступило 5 положительных отзывов. Отзывы представили: 1. **Н. Г. Бобенко**, канд. физ.-мат. наук, младший научный сотрудник лаборатории физики нелинейных сред Института физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, *без замечаний*. 2. **А. В. Попов**, канд. физ.-мат. наук, доц., доцент

кафедры современных специальных материалов Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова, г. Барнаул, *без замечаний*. 3. **П. Э. Рубин**, доктор философии по физике (PhD in Physics), старший научный сотрудник лаборатории теории твердого тела Тартуского университета, Эстония, *без замечаний*. 4. **В. А. Килин**, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры высшей математики и математической физики Национального исследовательского Томского политехнического университета, *без замечаний*. 5. **И. Е. Кареев**, канд. хим. наук, заведующий лабораторией молекулярных проводников и магнетиков Института проблем химической физики РАН, г. Черноголовка, *с замечанием*: Автор утверждает, что расчетные спектры оптического поглощения эндоэдральных комплексов хорошо совпадают с экспериментальными. Хотелось бы понять, что значит «хорошее совпадение», если визуальное хорошее совпадения не наблюдается (рис. 2 и 3 автореферата).

В отзывах отмечается, что физика углеродных наноструктур является одной из молодых, но бурно развивающихся областей науки, а фуллерены и УНТ, обладающие уникальными оптическими, электро- и теплопроводящими свойствами, весьма перспективны для использования в энергетике, медицине, биологии и наноэлектронике. Автором вычислены энергетические спектры фуллеренов C_{72} и C_{74} и на их основе – спектры оптического поглощения этих систем, а также энергетические спектры кластеров УНТ, состоящих из 30, 50, 70, 90 и 190 атомов. Отличительной особенностью диссертационного исследования Т. Э. Назаровой является учет кулоновского взаимодействия электронов на одном узле, которое в исследуемых системах велико. Полученные новые физические представления о природе электронного строения и свойств углеродных наноструктур позволят существенно повысить точность расчетов электронных характеристик углеродных наноматериалов.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что **Д. М. Дзедзисашвили** является высококвалифицированным специалистом в области теории конденсированного состояния, связанной с моделью Хаббарда; **Ю.А. Хон** является известным специалистом в области электронной структуры и физических свойств материалов; в **Омском государственном университете**

им. Ф.М. Достоевского работают квалифицированные специалисты, известные своими достижениями в области физики конденсированного состояния, в том числе в области исследования свойств углеродных наноматериалов.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработана научная концепция для описания углеродных наносистем как систем с сильным кулоновским взаимодействием, основанная на модели Хаббарда и позволившая выявить качественно новые закономерности исследуемых явлений;

предложены новые методы расчета энергетического спектра и спектров оптического поглощения фуллеренов и кластеров углеродной нанотрубки с учетом сильного кулоновского взаимодействия π -электронов на одном узле, позволяющие существенно повысить точность расчетов электронных характеристик исследуемых материалов;

доказано, что все изученные углеродные наноматериалы следует описывать как сильно коррелированные системы.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказано влияние сильного кулоновского взаимодействия π -электронов на одном узле на механизм изменения электронных свойств углеродных наносистем, приводящее к расщеплению энергетического спектра на две хаббардовские подзоны с формированием щели в энергетическом спектре;

получены новые физические представления о природе электронного строения и свойств углеродных наноструктур, которые вносят вклад в расширение представлений об изучаемом явлении;

применительно к проблематике в диссертации *результативно использованы* методы численного и аналитического анализа;

изложены результаты численных и аналитических расчетов важнейших параметров электронного спектра, демонстрирующие реалистичность построенной модели;

изучены оптические свойства различных фуллеренов и эндоэдральных комплексов на их основе, с помощью которых оказывается возможной идентификация вновь выделенных фуллеренов;

проведена модернизация существующих теоретических моделей и программных продуктов для численного анализа предложенной модели.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

определены условия, соответствующие экспериментальным данным, при которых построенная модель реалистично описывает электронные энергетические спектры и свойства фуллеренов и углеродных нанотрубок, в частности, показано, что рост УНТ при синтезе идет как конкуренция между процессами дальнейшего роста нанотрубки и свертывания растущих кластеров в фуллерены с числом атомов, равным 60–70;

представлены выражения для вычисления энергетических спектров фуллеренов и УНТ и анализа параметров спектров, позволяющие оценить влияние сильного кулоновского взаимодействия на свойства наносистем. Опираясь на новые представления, возможно предсказывать вид проводимости в исследуемых наносистемах и оценивать значения таких электронных характеристик, как ширина хаббардовских подзон и щель между занятыми и вакантными уровнями, что является актуальным при их практическом применении, например, в наноэлектронике, при создании на основе изученных фуллеренов и УНТ различных электронных и оптических устройств.

Рекомендации об использовании результатов диссертационного исследования. Полученные результаты могут быть использованы в научных и образовательных учреждениях, в которых ведутся исследования по сходной тематике: Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, Казанском (Приволжском) федеральном университете, Омском государственном университете им. Ф.М. Достоевского, Национальном исследовательском Томском государственном университете, Физико-техническом институте имени А.Ф. Иоффе РАН (г. Санкт-Петербург), Национальном исследовательском центре «Курчатовский институт» (г. Москва), в том числе Петербургском институте ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Институте проблем химической физики РАН (г. Черноголовка), Институте физики прочности и материаловедения СО РАН (г. Томск) и др.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

идея базируется на использовании общепринятых теоретических, математических и феноменологических подходов, существующих в современной физике конденсированного состояния и используемых при описании электронной структуры и оптических свойств углеродных наноматериалов;

использовано сопоставление результатов работы с полученными ранее экспериментальными данными и теоретическими результатами других авторов по рассматриваемой тематике;

установлено качественное, а во многих случаях также и количественное согласие авторских результатов с результатами, представленными в независимых источниках по данной тематике.

Научная новизна работы заключается в том, что в диссертационном исследовании впервые 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). Показано, что электронный спектр фуллеренов и нанотрубок, благодаря сильному кулоновскому взаимодействию, разделяется на две хаббардовские подзоны с образованием щели, которая может достигать значений ~ 1 эВ. На основании этого делается вывод о том, что нанотрубки хиральности (5,5) по своим электропроводящим свойствам являются полупроводниками, а не металлами, как следует из так называемого «правила кратности трем». Впервые проведено исследование роли сильного кулоновского взаимодействия в формировании оптических свойств фуллеренов C_{72} и C_{74} . Полученные в приближении молекулярных орбиталей спектры оптического поглощения фуллеренов C_{72} и C_{74} находятся в хорошем качественном согласии с экспериментальными данными, представленными в независимых источниках по данной тематике. Впервые 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 на один атом, с изменением количества атомов в них. Показано, что зависимость средней энергии на атом от числа атомов в кластере в области ~ 60 – 70 атомов имеет максимум, поэтому

в процессе роста УНТ кластеры, состоящие из 60–70 атомов, могут с равной вероятностью образовать фуллерены C_{60} или продолжать расти дальше – до УНТ, имеющих макроскопическую длину.

Личный вклад соискателя состоит в: непосредственном участии в постановке цели и задач исследования, выборе методов их решения, обсуждении полученных результатов, подготовке публикаций по выполненной работе. Проведение теоретических исследований, построение моделей расчета, выполнение компьютерного моделирования, обработка полученных результатов осуществлены автором лично.

Диссертация отвечает критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней для диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, и, в соответствии с пунктом 9 Положения, является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение научной задачи о влиянии 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), и, как следствие, на формирование оптических свойств исследуемых систем, имеющей значение для развития физики конденсированного состояния.

На заседании 26.10.2017 диссертационный совет принял решение присудить **Назаровой Т.Э.** ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 7 докторов наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании, из 24 человек, входящих в состав совета, проголосовал: за – 17, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Заместитель председателя
диссертационного совета

Ученый секретарь
диссертационного совета



Ивонин Иван Варфоломеевич

Киреева Ирина Васильевна

26.10.2017