

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Лобанова Бориса Владимировича  
«Энергетический спектр и спектры оптического поглощения фуллеренов  
и эндоэдральных наночастиц на их основе» на соискание ученой степени кандидата  
физико-математических наук по специальности  
01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Диссертация Лобанова Бориса Владимировича посвящена изучению влияния сильного внутриузельного кулоновского взаимодействия на электронное строение фуллеренов. Интерес к этим материалам не ослабевает уже несколько десятилетий благодаря уникальности и разнообразию их физических и химических свойств. В настоящее время считается, что такие углеродные наноматериалы, как графен, углеродные нанотрубки и фуллерены обладают огромными перспективами для применения в различных областях науки и техники. На их основе можно создавать как электронные и оптические приборы, так и использовать их в материаловедении в качестве присадок к различным композиционным материалам, а также в медицине для таргетной доставки лекарств.

Уникальные физические свойства фуллеренов обусловлены, прежде всего, их электронным строением и, в частности, энергетическим спектром носителей тока и плотностью электронных состояний. Несмотря на достаточно богатый опыт изучения углеродных наносистем, проблема понимания их электронных и оптических свойств все еще актуальна. Интерпретация экспериментальных данных ранее проводилась на основе теоретических представлений, не учитывающих наличие в этих системах внутриузельного кулоновского взаимодействия, которое в этих системах велико и достигает значений  $\sim 10$  эВ. Именно поэтому анализ электронного строения фуллеренов в рассматриваемой работе проводится в рамках модели Хаббарда, позволяющей наиболее корректно учесть такое взаимодействие. Энергетические спектры, полученные в диссертации в приближении статических флуктуаций, в результате учета кулоновского взаимодействия  $\pi$ -электронов, характеризуются расщеплением энергетических уровней системы на две группы – хаббардовские подзоны. В подзоне с большими состояниями энергии находятся состояния электронов, соответствующие двукратному заполнению узлов  $\pi$ -электронами, в подзоне с меньшими значениями энергии – состояния электронов, соответствующие однократному заполнению.

Таким образом, согласно результатам диссертации, кулоновское взаимодействие приводит к полной перестройке энергетического спектра исследуемых систем. Это ставит под сомнение ранее полученные с помощью простых зонных расчетов результаты. Результаты, полученные в диссертации Б.В. Лобанова для фуллеренов, позволяют так интерпретировать спектры оптического поглощения, что становится возможным идентификация вновь полученных фуллеренов.

Положения, выносимые на защиту, изложены последовательно, они аргументированы и подтверждаются физической обоснованностью выбранной модели, применением современных, хорошо апробированных методов расчета, а также качественным согласием полученных результатов с набором экспериментальных данных по изучаемым системам. Автореферат дает полное

представление о диссертации, ее логике и результатах. Полученные в работе новые научные результаты и сделанные автором выводы с достаточной полнотой опубликованы в научных журналах, рекомендованных ВАК при Минобрнауки России, и представлены на различных всероссийских и международных конференциях.

В качестве замечания отмечу, что из содержания автореферата не ясно как рассчитывалась атомная структура металлокомплексов, включая положения атомов металла и углерода, которая является основой в методах расчета электронной структуры.

Сделанное замечание не снижает научную значимость результатов диссертационного исследования. Диссертация Лобанова Бориса Владимировича «Энергетический спектр и спектры оптического поглощения фуллеренов и эндоэдральных наночастиц на их основе» выполнена на актуальную тему и представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем требованиям действующего «Положения о присуждении ученых степеней», предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Профессор кафедры наноматериалов и нанотехнологий  
ФГАОУ ВО «Белгородский государственный  
национальный исследовательский университет»,  
доктор физико-математических наук  
(01.04.07 – Физика конденсированного состояния)

Липницкий Алексей Геннадьевич  
lipnitskii@bsu.edu.ru

20 февраля 2019 г.

Подпись А. Г. Липницкого удостоверяю



*Сведения об организации:*

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Белгородский государственный национальный исследовательский университет»

Почтовый адрес: 308015, г. Белгород, ул. Победы, 85

Телефон: (4722) 30-12-11; E-mail: [Info@bsu.edu.ru](mailto:Info@bsu.edu.ru);

Адрес сайта: <https://www.bsu.edu.ru>