

Отзыв научного руководителя
доктора физико-математических наук Н. В. Мельниковой
на диссертацию Лобанова Бориса Владимировича
«Энергетический спектр и спектры оптического поглощения фуллеренов
и эндоэдральных наночастиц на их основе», представленную
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Диссертационная работа Б. В. Лобанова посвящена вычислению энергетических спектров π -электронной подсистемы фуллеренов и их эндоэдральных производных с учетом сильного кулоновского взаимодействия электронов и моделированию на основе энергетических спектров оптического поглощения фуллеренов. Изучению фуллеренов в настоящее время уделяется большое внимание в связи с тем, что их свойства являются многообещающими в плане практического применения. Фуллерены уже используются для упрочнения сталей и в медицине, исследуется возможность применения фуллеренов в основе водородных накопителей и для создания элементной базы электроники.

В настоящее время особый интерес у исследователей вызывают различные производные фуллеренов, в частности эндоэдральные соединения. Свойства фуллерена после внедрения внутрь его углеродного каркаса той или иной частицы, очевидно, будут отличаться от первоначальных. Если внутрь углеродного каркаса внедряются атомы металла, их валентные электроны переходят на оболочку фуллерена. При этом происходит перестройка электронной структуры. Строение углеродного каркаса прямо влияет на наблюдаемые физические свойства эндоэдрального комплекса. В связи с этим актуальной является задача предсказания или моделирования свойств эндоэдральных соединений в зависимости от изомерии углеродного каркаса и величины переноса заряда.

Современные исследования электронных свойств фуллеренов опираются на результаты, полученные с помощью метода Хюккеля, который учитывает перекрытие волновых функций соседних атомов, имеющее место в системах с sp^2 -гибридизацией – именно к ним и относятся фуллерены. Первые исследования, проведенные с использованием такого подхода, были выполнены задолго до экспериментального обнаружения фуллеренов. Полученный за все время изучения фуллеренов экспериментальный материал не подтвердил предсказания, сделанные на основе таких расчетов. Другие, более продвинутые подходы к исследованию электронного строения фуллеренов не дали исчерпывающего объяснения явлениям и свойствам, обнаруживаемым экспериментально, что, скорее всего, связано с игнорированием кулоновского отталкивания электронов. Хотя еще в 1974 году А. А. Левиным было показано, что величина кулоновского взаимодействия в системах с sp^2 -гибридизацией является достаточно большой (~ 10 эВ), это подтверждалось и в более поздних исследованиях. Поэтому для описания таких систем следует применять модель Хаббарда, в которой можно корректно учесть и перескоки электронов между соседними узлами, и внутриузельное кулоновское взаимодействие. Этим обусловлена актуальность диссертационной работы Б. В. Лобанова и научная значимость полученных результатов.

Цель и задачи работы, методы исследования, а также полученные в работе результаты и выводы последовательно и очень грамотно изложены в тексте диссертации и отражены в автореферате. К основным результатам диссертационной

работы Б. В. Лобанова можно отнести полученные в модели Хаббарда энергетические спектры фуллеренов C_{60} , C_{70} , а также изомеров фуллеренов C_{80} и C_{82} и смоделированные на их основе спектры оптического поглощения как «чистых» фуллеренов, так и эндоэдральных металлокомплексов с учетом различного переноса заряда. Хорошее качественное согласие полученных в диссертации модельных спектров оптического поглощения с имеющимися экспериментальными данными говорит о корректности предлагаемого соискателем подхода. Кроме того, представляют интерес и результаты по изучению влияния величины переноса заряда на спектры оптического поглощения исследованных систем, позволившие, в частности, объяснить влиянием молекулярного поля, создаваемого подсистемой сильно коррелированных π -электронов, смещение пиков полос поглощения, наблюдаемое экспериментально.

Б. В. Лобанов за время работы над диссертацией показал себя самостоятельным и грамотным исследователем, обладающим всеми необходимыми навыками и базовыми знаниями для самостоятельной работы в области физики конденсированного состояния. Он способен сконцентрироваться и очень быстро решить поставленную перед ним задачу – ему пришлось дополнительно исследовать зависимость оптических свойств от величины переноса заряда в эндоэдральных комплексах, с этой задачей он справился за две недели. Полученные результаты существенно повлияли на содержание работы, ему пришлось провести более глубокий анализ полученных ранее результатов с учетом вновь полученных данных, и он с этим успешно справился. Следует отметить такие его личные качества, как интеллигентность и вдумчивость, а также грамотность, что, к сожалению, встречается все реже и реже.

Результаты исследования опубликованы в российских журналах, переводные версии которых входят в Web of Science. Работа выполнена на хорошем научном уровне, удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а Борис Владимирович Лобанов, безусловно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Научный руководитель

старший научный сотрудник 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», (634050, Томск, пр. Ленина, 36; (3822) 529-852; www.tsu.ru; rector@tsu.ru), доктор физико-математических наук (01.04.07 – Физика конденсированного состояния)

07.05.2018

Мельникова

Мельникова Наталия Васильевна

Подпись Н. В. Мельниковой удостоверяю

Ученый секретарь Ученого совета ТГУ



Н. А. Сазонтова