

Отзыв научного руководителя

кандидата физико-математических наук, доцента А. И. Мурзашева
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 расчету энергетических спектров и моделированию спектров оптического поглощения фуллеренов и их эндоэдральных производных с учетом сильного внутриузельного кулоновского взаимодействия в π -электронной подсистеме. Выбранный объект исследования – фуллерены – в настоящее время привлекает значительное внимание исследователей. Это объясняется тем, что в силу своих уникальных структурных особенностей фуллерены могут применяться в самых разнообразных областях. В металлургии фуллерены используются для упрочнения сталей, в медицине рассматриваются способы целенаправленной доставки лекарств к месту их применения с помощью фуллеренов, в области энергетики ведутся работы по созданию накопителей водорода на базе фуллеренов. Фуллерены также являются перспективным сырьем для элементов микроэлектроники.

Наряду с «чистыми» фуллеренами особенно активно изучаются различные их производные, среди которых особую нишу занимают эндоэдральные металлофуллерены. При внедрении внутрь углеродной оболочки фуллерена атомов других веществ его свойства изменяются. Так, при внедрении металлических кластеров внутрь фуллерена на его оболочку передаются валентные электроны атомов металла, входящих в состав кластера (иногда не полностью). В настоящее время нет полной ясности в том, как при этом происходит перестройка электронной структуры. Помимо этого подавляющее большинство эндоэдральных соединений формируется на основе высших фуллеренов, которые характеризуются сложным изомерным составом. Строение углеродного каркаса прямо влияет на наблюдаемые физические свойства эндоэдрального комплекса. В связи с этим актуальной является задача предсказания, моделирования экспериментально наблюдаемых свойств эндоэдральных соединений в зависимости от изомерии углеродного каркаса и величины переноса заряда.

Современные исследования электронных свойств фуллеренов опираются на результаты, полученные в рамках расчетов методом Хюккеля. Данный метод учитывает перекрытие волновых функций соседних атомов, имеющее место в системах с sp^2 -гибридизацией, к которым относятся фуллерены. Первые

исследования, проведенные с использованием такого подхода, были выполнены еще задолго до экспериментального обнаружения фуллеренов. Однако накопленный за время изучения фуллеренов экспериментальный материал не подтвердил предсказания, сделанные на основе таких расчетов. Помимо хюккелевских расчетов имеются и другие, более продвинутые, подходы к исследованию электронного строения фуллеренов, однако нельзя сказать, чтобы они давали исчерпывающее объяснение явлениям и свойствам, обнаруживаемым экспериментально.

По всей видимости, это связано с тем, что при описании π -электронной системы фуллеренов помимо перескоков между соседними узлами необходимо также учитывать кулоновское отталкивание. Еще в 1974 году А. А. Левиным было показано, что величина кулоновского взаимодействия в системах с sp^2 -гибридизацией достаточно большая (~ 10 эВ); это подтверждается и более поздними исследованиями. Для описания таких систем должна применяться модель Хаббарда, корректно учитывающая и перескоки электронов между соседними узлами, и внутриузельное кулоновское взаимодействие.

Исходя из вышесказанного, требуется пересмотр представлений об электронном строении фуллеренов с учетом сильных корреляций. Это обуславливает актуальность диссертационной работы Б. В. Лобанова и научную значимость полученных им результатов.

К основным результатам диссертационной работы Б. В. Лобанова следует отнести полученные в модели Хаббарда энергетические спектры фуллеренов C_{60} , C_{70} , а также изомеров фуллеренов C_{80} и C_{82} , смоделированные на основе энергетических спектров спектры оптического поглощения как «чистых» фуллеренов, так и эндоэдральных металлокомплексов при различном переносе заряда. Хорошее качественное согласие полученных в диссертации расчетных спектров оптического поглощения с имеющимися экспериментальными данными свидетельствует о правильности использованного к изучению фуллеренов подхода.

Также новыми и интересными являются результаты по изучению влияния величины переноса заряда на спектры оптического поглощения исследованных систем. В частности, это позволило объяснить смещение пиков полос поглощения, наблюдаемое в эксперименте, влиянием молекулярного поля, создаваемого подсистемой сильно коррелированных π -электронов.

Б. В. Лобанов за время работы над диссертацией показал себя самостоятельным, грамотным исследователем, обладающим всеми навыками и базовыми знаниями, необходимыми для работы в области физики конденсированного состояния. Соискателя можно охарактеризовать как человека целеустремленного, исполнительного, открытого для новых знаний, умеющего

аккуратно и вдумчиво подойти к решению той или иной задачи. Он обладает широкой эрудицией, отличается терпимостью, толерантностью и мягким спокойным характером.

В целом работа Б. В. Лобанова выполнена на высоком научном уровне, результаты исследования опубликованы в российских журналах, переводные версии которых входят в Web of Science. Диссертация удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а Б. В. Лобанов, несомненно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Научный руководитель

доцент кафедры физики и материаловедения
федерального государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего образования

«Марийский государственный университет»

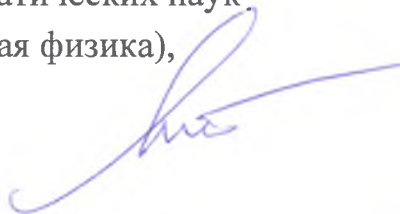
(424000, г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, 1;

(8362)-68-80-02; <http://marsu.ru>; rector@marsu.ru),

кандидат физико-математических наук

(01.04.02 – Теоретическая физика),

доцент



Мурзашев Аркадий Ислибаевич

07.05.2018

Подпись А. И. Мурзашева удостоверяю

Проректор по научной работе
и инновационной деятельности – директор
Программы развития опорного университета



 А. Н. Леухин