

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 21 марта 2019 года публичной защиты диссертации Лобанова Бориса Владимировича «Энергетический спектр и спектры оптического поглощения фуллеренов и эндодральных наночастиц на их основе» по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

Присутствовали 19 из 24 членов диссертационного совета, из них 7 докторов наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния:

1. Багров В. Г., доктор физико-математических наук, профессор, председатель диссертационного совета, 01.04.02
2. Ивонин И. В., доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, заместитель председателя диссертационного совета, 01.04.10
3. Киреева И. В., доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, ученый секретарь диссертационного совета, 01.04.07
4. Бордовицын В. А., доктор физико-математических наук, профессор, 01.04.02
5. Брудный В. Н., доктор физико-математических наук, профессор, 01.04.10
6. Бухбиндер И. Л., доктор физико-математических наук, профессор, 01.04.02
7. Войцеховский А. В., доктор физико-математических наук, профессор, 01.04.10
8. Давыдов В. Н., доктор физико-математических наук, профессор, 01.04.10
9. Коротаев А. Д., доктор физико-математических наук, профессор, 01.04.07
10. Ляхович С. Л., доктор физико-математических наук, профессор, 01.04.02
11. Мельникова Н. В., доктор физико-математических наук, 01.04.07
12. Потекаев А. И., доктор физико-математических наук, профессор, 01.04.07
13. Старенченко В. А., доктор физико-математических наук, профессор, 01.04.07
14. Трифонов А. Ю., доктор физико-математических наук, профессор, 01.04.02
15. Тюменцев А. Н., доктор физико-математических наук, профессор, 01.04.07
16. Чумляков Ю. И., доктор физико-математических наук, профессор, 01.04.07
17. Шаповалов А. В., доктор физико-математических наук, профессор, 01.04.02
18. Шарاپов А. А., доктор физико-математических наук, профессор, 01.04.02
19. Эрвье Ю. Ю., доктор физико-математических наук, профессор, 01.04.10

Заседание провел председатель диссертационного совета, доктор физико-математических наук, профессор Багров Владислав Гавриилович.

По результатам защиты диссертации тайным голосованием (результаты голосования: за присуждение ученой степени – 19, против – нет, недействительных бюллетеней – нет) диссертационный совет принял решение присудить Б. В. Лобанову ученую степень кандидата физико-математических наук.

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

решение диссертационного совета от 21.03.2019 № 17

О присуждении **Лобанову Борису Владимировичу**, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация **«Энергетический спектр и спектры оптического поглощения фуллеренов и эндодральных наночастиц на их основе»** по специальности **01.04.07** – Физика конденсированного состояния принята к защите 17.12.2018 (протокол заседания № 16) диссертационным советом **Д 212.267.07**, созданным на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, приказ о создании диссертационного совета № 105/нк от 11.04.2012).

Соискатель **Лобанов Борис Владимирович**, 1991 года рождения.

В 2013 году соискатель окончил федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Марийский государственный университет».

В 2018 году соискатель очно окончил аспирантуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Марийский государственный университет».

Работает в должности преподавателя кафедры физики и материаловедения в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Марийский государственный университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации; по совместительству – в должности инженера-исследователя лаборатории конструкционных и функциональных

материалов Сибирского физико-технического института имени академика В.Д. Кузнецова в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация выполнена на кафедре физики и материаловедения федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Марийский государственный университета» Министерства образования и науки Российской Федерации и в лаборатории конструкционных и функциональных материалов 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:

Мурзашев Аркадий Ислибаевич, кандидат физико-математических наук, основное место работы: федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Марийский государственный университет», кафедра физики и материаловедения, доцент;

Мельникова Наталия Васильевна, доктор физико-математических наук, основное место работы: 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:

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

Корусенко Петр Михайлович, кандидат физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Омский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук, лаборатория физики наноматериалов и гетероструктур, младший научный сотрудник

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «**Волгоградский государственный университет**», г. Волгоград, в своем положительном отзыве, подписанном **Конобеевой Наталией Николаевной** (кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра информационных систем и компьютерного моделирования, доцент) и **Хоперсковым Александром Валентиновичем** (доктор физико-математических наук, профессор, кафедра информационных систем и компьютерного моделирования, заведующий кафедрой) указала, что в настоящее время исследованию свойств фуллеренов и различных соединений на их основе, в том числе эндодральных металлокомплексов, уделяется значительное внимание. При этом во многих теоретических исследованиях интерпретация электронных свойств данных систем делается на основании хюккелевских расчетов. Однако теоретические предсказания, сделанные на основе таких вычислений, не согласуются с результатами экспериментальных наблюдений. Другие, более продвинутые методы также не дают исчерпывающего объяснения экспериментально наблюдаемым свойствам фуллеренов. По мнению Б. В. Лобанова, несогласованность результатов теоретических исследований и экспериментальных данных обусловлена тем, что используемые при описании электронной структуры фуллеренов методы не учитывают внутриузельное кулоновское взаимодействие π -электронов. Актуальность темы исследования определяется необходимостью пересмотреть результаты ранних работ, полученных без учета сильного кулоновского взаимодействия, а также огромными перспективами практического применения исследуемых материалов. Б. В. Лобановым вычислены энергетические спектры и спектры оптического поглощения семи изомеров фуллерена C_{80} ; для изомеров, синтезированных экспериментально (изомеры № 2(D_2) и № 7(I_h)), проведено сравнение теоретических спектров поглощения с имеющимися экспериментальными данными; установлено,

что при переносе заряда в $-2e$ на углеродный каркас изомера № 7(I_h) удается хорошо описать наблюдаемые спектры поглощения эндоэдральных металлокомплексов $M@C_{80}$ ($M=Ca, Ba, Sr$); получены энергетические спектры и спектры оптического поглощения трех экспериментально синтезированных изомеров фуллерена C_{82} – №3(C_2), №6(C_s) и №9(C_{2v}); сопоставлены экспериментальные и теоретические спектры оптического поглощения изомера № 3(C_2) в нейтральном и анионных состояниях; смоделированы спектры поглощения эндоэдральных металлокомплексов $Gd_2C_2@C_{82}$ (№6(C_s)), $Gd@C_{82}$ и $Ho@C_{82}$ и их моноанионов (№9(C_{2v})), определена величина переноса заряда в случае каждого эндоэдрального комплекса; проанализированы изменения в спектре оптического поглощения при изменении переноса заряда. Практическая ценность работы заключается в том, что оптический метод контроля является самым дешевым, не требует изменения анализируемого вещества в отличие от химических методов.

Соискатель имеет 13 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 11 работ, из них в рецензируемых российских научных изданиях опубликовано 6 работ (все статьи опубликованы в научных журналах, переводные версии которых входят в Web of Science), в сборниках материалов международной и всероссийских научных школ и молодежной научно-инновационной школы опубликовано 5 работ. Общий объем публикаций – 3,18 а.л., авторский вклад – 0,64 а.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. **Лобанов Б. В.** Энергетический спектр и оптические переходы в изомерах фуллерена C_{80} / Б. В. Лобанов, А. И. Мурзашев // Физика твердого тела. – 2013. – Т. 55, № 4. – С. 797–805. – 0,6 / 0,1 а.л.

в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:

Lobanov B. V. Energy spectrum and optical transitions in C_{80} fullerene isomers / B. V. Lobanov, A. I. Murzashev // *Physics of the solid state*. – 2013. – Vol. 55, is. 4 – P. 868–877. – DOI: 10.1134/S1063783413040173.

2. Кареев И. Е. Эндоедральный фуллерен $Gd_2C_2@C_{82}$ как сильно коррелированная электронная система / И. Е. Кареев, В. П. Бубнов, А. И. Мурзашев, **Б. В. Лобанов** // *Физика твердого тела*. – 2015. – Т. 57, № 11. – С. 2254–2261. – 0,58 / 0,11 а.л.

в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:

Kareev I. E. Endohedral fullerene $Gd_2C_2@C_{82}$ as a strongly correlated electron system / I. E. Kareev, V. P. Bubnov, A. I. Murzashev, **B. V. Lobanov** // *Physics of the solid state*. – 2015. – Vol. 57, is. 11. – P. 2323–2330. – DOI: 10.1134/S1063783415110189.

3. **Лобанов Б. В.** Оптическое поглощение фуллерена C_{60} в рамках концепции сильно коррелированного состояния / Б. В. Лобанов, А. И. Мурзашев // *Известия высших учебных заведений. Физика*. – 2016. – Т. 59, № 6. – С. 88–93. – 0,51 / 0,06 а.л.

в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:

Lobanov B. V. Optical absorption of fullerene C_{60} within the concept of a strongly correlated state / B. V. Lobanov, A. I. Murzashev // *Russian physics journal*. – 2016. – Vol. 59, is. 6. – P. 856–861. – DOI: 10.1007/s11182-016-0845-1.

4. Бубнов В. П. Энергетический спектр и спектры оптического поглощения эндоедральных металлофуллеренов с Gd и Ho как сильно коррелированных π -электронных систем / В. П. Бубнов, И. Е. Кареев, **Б. В. Лобанов**, А. И. Мурзашев, В. М. Некрасов // *Физика твердого тела*. – 2016. – Т. 58, № 8. – С. 1639–1645. – 0,48 / 0,1 а.л.

в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:

Bubnov V. P. Energy and optical absorption spectra of endohedral metallofullerenes with Gd or Ho as strongly correlated π -electron systems / V. P. Bubnov, I. E. Kareev, **B. V. Lobanov**, A. I. Murzashev, V. M. Nekrasov // *Physics of the solid state*. – 2016. – Vol. 58, is. 8. – P. 1698–1704. – DOI: 10.1134/S1063783416080072.

5. **Лобанов Б. В.** Электронные и оптические свойства фуллерена C_{70} в рамках концепции сильно коррелированного состояния / Б. В. Лобанов, А. И. Мурзашев // Физика твердого тела. – 2017. – Т. 59, № 2. – С. 409–413. – DOI: 10.21883/FTT.2017.02.44071.474. – 0,33 / 0,08 а.л.

в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:

Lobanov B. V. Electron and Optical Properties of Fullerene C_{70} within the Conception of a Strongly Correlated State / B. V. Lobanov, A. I. Murzashev // Physics of the solid state. – 2017. – Vol. 59, is. 2. – P. 423–427. – DOI: 10.1134/S1063783417020159.

На автореферат поступило 5 положительных отзывов. Отзывы представили:

1. **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*.
2. **П. П. Каминский**, д-р физ.-мат. наук, временно исполняющий обязанности директора Института физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, *с замечанием*: в работе не получены выражения для средней энергии, теплоемкости и другие важные характеристики, которые можно было бы получить из модели Хаббарда для полноты картины, записав и решив уравнение дальней связи для корреляционных функций, что позволило бы не применять очень трудоемкий метод функций Грина.
3. **И. И. Попов**, д-р физ.-мат. наук, проф., профессор кафедры конструирования и производства радиоаппаратуры Поволжского государственного технологического университета, г. Йошкар-Ола, *с замечанием*: отсутствуют какие-либо предложения по возможному прикладному применению полученных научных результатов;
4. **А. Г. Липницкий**, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры наноматериалов и нанотехнологий Белгородского государственного национального исследовательского университета, *с замечанием*: из содержания автореферата не ясно, как рассчитывалась атомная структура металлокомплексов, включая положения атомов металла и углерода, которая является основой в методах расчета электронной структуры.
5. **Н. Г. Бобенко**, канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник Лаборатории физики нелинейных сред Института физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, *с замечаниями*: в автореферате встречаются некорректные выражения, например, «братъ во внимание» вместо

«принимать во внимание» (с. 11); нет единого стиля описания рисунков; из автореферата не ясно можно ли каким-то образом на основе данных о спектрах оптических поглощений определить, какой именно эндоэдральный комплекс ($\text{Ca}@C_{80}$, $\text{Sr}@C_{80}$, $\text{Ba}@C_{80}$) присутствует в экспериментальном образце (Рис. 3).

В отзывах отмечается, что открытие фуллерена дало толчок для развития целого направления в физике конденсированного состояния, а изобретение дугового метода получения фуллерена вызвало настоящий бум в исследованиях свойств нового материала и возможностей его применения в различных областях науки и техники. Сегодня для исследователей интересны не только чистые фуллерены, но и разнообразные соединения с их участием, в связи с чем, актуальность исследования не вызывает сомнений. В отличие от традиционных подходов, применяемых при изучении электронной структуры фуллеренов и их эндоэдральных соединений, соискателем подчеркивается и обосновывается определяющая роль внутриузельного кулоновского взаимодействия в формировании электронного спектра рассматриваемых систем. Б. В. Лобановым выявлено, что учет внутриузельного кулоновского взаимодействия π -электронов ведет к существенной перестройке энергетического спектра (его расщеплению) исследуемых фуллеренов и их эндоэдральных соединений, что ставит под сомнение ранее полученные с помощью простых зонных расчетов результаты; получена зависимость спектров оптического поглощения от величины переноса заряда в эндоэдральных системах, и достигнуто хорошее качественное согласие смоделированных спектров с экспериментальными данными; с помощью теоретически полученного и экспериментально измеренного спектра оптического поглощения в карбидном комплексе $\text{Gd}_2\text{C}_2@C_{82}$ определена величина переноса заряда в этой системе. Исследование вносит вклад в развитие физики конденсированного состояния, в частности в науку о наноматериалах. Полученные результаты позволяют так интерпретировать спектры оптического поглощения, что становится возможным идентификация вновь полученных фуллеренов.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что **Ю. А. Хон** является известным специалистом в области физики конденсированного состояния, в частности в области электронной структуры

и физических свойств различных материалов; **П. М. Корусенко** хорошо известен экспериментальными исследованиями структуры и свойств углеродных наноматериалов; в **Волгоградском государственном университете** работают высококвалифицированные специалисты, известные своими достижениями в области теоретических исследований углеродных наносистем.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработаны основы методики расчета энергетического спектра металлофуллеренов симметрии C_{2v} , позволившей интерпретировать экспериментально измеренные спектры оптического поглощения комплексов $Gd@C_{82}$ и $Ho@C_{82}$ в обычной и ионизированной формах;

предложен нетрадиционный подход к описанию физического механизма изменения спектров оптического поглощения изомеров фуллеренов C_{80} и C_{82} и их эндоэдральных соединений в зависимости от величины переноса заряда, когда дополнительные электроны, занимающие нижние состояния в верхней хаббардовской подзоне, формируют полосы в длинноволновой части спектра оптического поглощения;

доказано, что величина переноса заряда в эндоэдральных комплексах $M@C_{80}$ ($M = Ca, Ba, Sr$), $Gd_2C_2@C_{82}$ составляет два электрона, а полосы поглощения в ультрафиолетовом диапазоне в экспериментально наблюдаемых оптических спектрах формируется переходами, разрешенными правилами отбора, тогда как в видимой и ближней инфракрасной области определяющим является вклад запрещенных переходов.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказано утверждение о том, что учет внутриузельного кулоновского взаимодействия π -электронов играет определяющую роль в формировании электронных и оптических свойств фуллеренов C_{60} , C_{70} , C_{80} и C_{82} и их эндоэдральных соединений;

применительно к проблематике диссертации результативно использована модель Хаббарда в приближении статических флуктуаций, позволяющая учитывать

такие особенности исследуемых систем, как сильное внутриузельное взаимодействие π -электронов;

изложены мотивировки проведенных теоретических исследований, их результаты и возможные области применения;

изучены электронные и оптические свойства типичных и вновь синтезированных фуллеренов и эндоэдральных комплексов на их основе.

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

определены значения таких характеристик энергетического спектра фуллеренов C_{60} , C_{70} , C_{80} и C_{82} и их эндоэдральных соединений как энергии уровней, кратность вырождения и ширина запрещенной зоны, а на основе спектров оптического поглощения исследуемых систем получены данные о геометрической структуре изомеров и заряде молекулы фуллеренов;

представлены новые примеры применения модели Хаббарда для описания электронной структуры фуллеренов и их эндоэдральных соединений с учетом внутриузельного кулоновского отталкивания π -электронов, а именно: вычисления энергетических спектров и спектров оптического поглощения, на основе которых качественно объяснены особенности экспериментально наблюдаемых спектров оптического поглощения исследуемых фуллеренов и достигнуто количественное согласие с экспериментальными значениями энергетической щели между верхней занятой и нижней свободной молекулярной орбиталью, а также показано, что благодаря тому, что избыточные электроны занимают нижние состояния в верхней хаббардовской зоне, становятся возможными новые переходы, вносящие вклад в формирование спектра оптического поглощения.

Рекомендации об использовании результатов диссертационного исследования. Полученные результаты могут быть использованы в научных коллективах, исследующих и синтезирующих углеродные нанотрубки и фуллерены: в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова; Национальном исследовательском центре «Курчатовский институт» (г. Москва), в том числе в Петербургском институте ядерной физики им. П. Б. Константинова; Институте

проблем химической физики РАН (г. Черноголовка); Физико-техническом институте имени А. Ф. Иоффе РАН (г. Санкт-Петербург); Институте неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН (г. Новосибирск); Институте катализа им. Г. К. Борескова СО РАН (г. Новосибирск); Институте физики прочности и материаловедения СО РАН (г. Томск); Марийском государственном университете (г. Йошкар-Ола); Национальном исследовательском Томском государственном университете, в том числе в Сибирском физико-техническом институте имени академика В.Д. Кузнецова, а также в других научных и образовательных учреждениях.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

идея базируется на общеизвестном факте о том, что внутриузельное кулоновское взаимодействие электронов в фуллеренах велико и достигает значений порядка 10 эВ;

использованы хорошо апробированные модели и методы квантовой теории поля, такие как модель Хаббарда и метод функций Грина, с корректным физическим обоснованием предлагаемых методик и разработанных моделей и применением строгого математического инструментария;

установлено качественное согласие результатов диссертационной работы с соответствующими экспериментальными данными, представленными в многочисленных источниках.

Научная новизна работы заключается в том, что автором впервые исследована электронная структура и оптические свойства фуллеренов C_{60} , C_{70} , C_{80} и C_{82} и эндоэдральных комплексов на их основе, получены энергетические спектры и спектры оптического поглощения фуллеренов C_{60} , C_{70} , C_{80} и C_{82} , качественно согласующиеся с экспериментальными спектрами оптического поглощения, достигнуто количественное согласие с экспериментальными данными по энергетической щели между верхней занятой и нижней свободной молекулярной орбиталью, описан физический механизм влияния избыточного заряда углеродной оболочки фуллерена на спектр оптического поглощения, когда избыточные электроны, занимая нижние состояния в верхней хаббардовской зоне, вносят вклад в формирование полос поглощения в ультрафиолетовом диапазоне – переходами,

разрешенными правилами отбора, а в видимой и ближней инфракрасной области - запрещенными переходами.

Личный вклад соискателя состоит в: непосредственном участии в определении цели и постановке задач исследования, выполнении основного объема теоретических исследований, анализе и обсуждении полученных результатов, формулировке выводов, подготовке научных публикаций по теме диссертации. Основные результаты, изложенные в диссертации, получены автором лично либо в соавторстве, когда соискатель принимал активное участие на всех этапах выполнения.

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, связанной с описанием электронной структуры фуллеренов C_{60} , C_{70} , изомеров фуллеренов C_{80} и C_{82} и эндоэдральных комплексов на их основе с учетом сильного внутриузельного кулоновского взаимодействия и получением спектров оптического поглощения, имеющей значение для развития физики конденсированного состояния.

На заседании 21.03.2019 диссертационный совет принял решение присудить **Лобанову Б. В.** ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 19 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 – 19, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель

диссертационного совета



Багров Владислав Гаврилович

Ученый секретарь

диссертационного совета

Киреева Ирина Васильевна

21.03.2019