

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу

Шадрина Евгения Олеговича

«Исследование бесконечных квазиодномерных систем в приближении сильной связи»,

представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика

Диссертация Шадрина Е.О. посвящена теоретическому исследованию электронных и оптических свойств модельных углеродных нанотрубок (УНТ) как бесконечных квазиодномерных систем.

Актуальность темы диссертации достаточно очевидна, так как обусловлена большим интересом к оригинальным физическим свойствам нано-объектов, используемым в современных технологиях. Она также подтверждается огромным количеством экспериментальных и теоретических работ, имеющихся к настоящему времени. Это, несомненно, требует их критического изучения и анализа, что достаточно полно выполнено по исследуемой проблеме в диссертации Шадрина Е.О. в ее обзорной части.

Работа хорошо структурирована и состоит из введения, четырех глав и заключения.

Во **введении** дано описание современных подходов к решению рассматриваемой проблемы, обоснована актуальность темы, сформулированы цели работы, положения, выносимые на защиту, научная новизна полученных результатов и их практическая значимость.

В **первой главе** приведены основные сведения об УНТ, а именно: их структура и геометрическое строение, основные электронные и оптические свойства. Также представлен анализ основных результатов других авторов по теоретическому и экспериментальному исследованию электронного строения УНТ. На этой основе для расчета энергетического спектра и спектра оптического поглощения УНТ вполне обоснованно выбраны, в качестве

основных, известное приближение сильной связи и модель Хаббарда в приближении статических флуктуаций.

Во **второй главе** приведены результаты расчета энергетического спектра УНТ хиральностей (5,5) и (10,0). Показано, что при дополнительном учете сильного кулоновского взаимодействия π -электронов на одном узле ранее полученный энергетический спектр этих УНТ существенно перестраивается и разбивается на две хаббардовские подзоны. На основе проведенных расчетов объяснены спектры оптического поглощения фуллеренов C_{60} и C_{70} , форма которых находится в хорошем согласии с экспериментальной.

В **третьей главе** представлены результаты вычисления энергетического спектра углеродных нанотрубок хиральностей (9,0), (12,0) и (15,0) с учетом дальних «перескоков» электрона, параметры некоторых из них получены на основе экспериментальных данных. Показано, что учет таких «перескоков» приводит к уменьшению щели в энергетическом спектре исследованных УНТ.

В **четвертой главе** анализируются результаты расчета энергетического спектра и спектра оптического поглощения УНТ хиральностей (10,10), (11,9) и (12,8), которые наиболее близки к реальным и широко распространённым УНТ этих хиральностей. Установлено, что рассчитанные в упомянутых приближениях полосы поглощения вполне удовлетворительно соответствуют имеющимся экспериментальным данным.

Таким образом, в работе решены задачи, связанные с выбором адекватной модели для описания электронного строения УНТ, разработкой методов вычисления энергетического спектра в рамках этой модели, расчетом энергетических спектров и спектров оптического поглощения ряда УНТ с учетом кулоновского взаимодействия, в том числе – дальнего, и без его учета.

Теоретическая и практическая **значимость** работы заключается в том, что автором убедительно доказана необходимость учета кулоновского взаимодействия на одном узле при теоретическом исследовании спектров УНТ. В работе **впервые** показано, что учет этого взаимодействия приводит к коренной перестройке энергетического спектра – образованию двух

хаббардовских подзон. Это существенным образом влияет на такие характеристики системы, зависящие от энергетического спектра, как электропроводность и спектр оптического поглощения. Важным заключением является и вывод о необходимости пересмотра так называемого «правила кратности трем» при анализе экспериментального материала. Несомненный интерес представляют и конкретные численные результаты, полученные для УНТ различных хиральностей.

Качественное и отчасти количественное согласие полученных теоретических результатов с существующими экспериментальными данными подтверждает их **достоверность**, а также правильность сделанного выбора методов и приближений при расчете характеристик УНТ как систем с сильными корреляционными взаимодействиями.

По материалам представляемой работы можно сформулировать следующие замечания:

- в рамках предложенной модели исследуются лишь бесконечные квазиодномерные системы, а не реальные углеродные нанотрубки, имеющие конечные размеры и структуру, содержащую различные типы дефектов, влияние которых практически не обсуждается в работе,
- в системах с сильной корреляцией обычно проявляются такие эффекты, как экранировка Кондо, конкуренция зарядового и спинового упорядочения и др., которые не могут быть описаны в рамках модели Хаббарда и, следовательно, не учтенные в представленных результатах,
- используемый термин «перескок» электрона представляется не вполне физическим.

Указанные замечания не меняют общей высокой оценки работы. Диссертационная работа Шадрина Е.О. представляет собой законченное исследование актуальной проблемы по спектроскопии нано-объектов и выполнена на хорошем научном уровне, что свидетельствует о достижении автором высокой научной квалификации.

Общая оценка диссертации. Материалы диссертации хорошо оформлены и иллюстрированы, хотя можно сделать несущественные замечания по тексту. Все основные результаты опубликованы в авторитетных

научных изданиях, а также трудах российских и международных научных конференций. Выполненные исследования поддерживались грантом ФБГОУ ВПО «Марийский государственный университет» № 2014-003а «Энергетический спектр и оптические спектральные характеристики фуллеренов C_{74} и C_{82} и углеродных нанотрубок в рамках модели Хаббарда». Автореферат правильно и достаточно полно отображает содержание диссертации.

Считаю, что диссертационная работа Шадрин Е.О. удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям, а сам Евгений Олегович Шадрин заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика.

Официальный оппонент:

профессор кафедры высшей математики ФГАОУ ВО НИ ТПУ

д.ф.-м.н., доцент

Килин Виктор Андреевич

Подлинность подписи Килина **В.А.** подтверждаю

Учёный секретарь Учёного совета НИ ТПУ

28.09.2015



О.А. Ананьева

Шифр специальности: 01.04.02. – теоретическая физика

Тел.: 89138555728

e-mail: vak@tpu.ru

Почтовый адрес:

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», Россия, 634050, г. Томск, проспект Ленина, дом 30.