

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 15 октября 2015 года публичной защиты диссертации Шадрина Евгения Олеговича «Исследование бесконечных квазиодномерных систем в приближении сильной связи» по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

На заседании диссертационного совета присутствовали 19 из 24 утверждённых членов диссертационного совета, из них 7 докторов наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика:

1.	Дударев Е.Ф., и.о. председателя диссертационного совета	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
2.	Киреева И.В., ученый секретарь	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
3.	Бордовицын В.А.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
4.	Брудный В.Н.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
5.	Бухбиндер И.Л.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
6.	Гермогенов В.П.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
7.	Давыдов В.Н.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
8.	Караваев Г.Ф.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
9.	Коротаев А.Д.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
10.	Лавров П.М.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
11.	Ляхович С.Л.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
12.	Мельникова Н.В.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
13.	Старенченко В.А.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07

14.	Толбанов О.П.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
15.	Трифонов А.Ю.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
16.	Тюменцев А.Н.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
17.	Тютерев В.Г.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
18.	Шаповалов А.В.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
19.	Шарапов А.А.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02

В связи с командировками председателя диссертационного совета доктора физико-математических наук, профессора Багрова Владислава Гавриловича и заместителя председателя диссертационного совета доктора физико-математических наук, старшего научного сотрудника Ивонина Ивана Варфоломеевича приказом по ТГУ от 13.10.2015 № 636/ОД обязанности председателя диссертационного совета для проведения заседания возложены на члена диссертационного совета, главного научного сотрудника лаборатории физики неупругости материалов Сибирского физико-технического института имени академика В.Д. Кузнецова ТГУ, доктора физико-математических наук, профессора Дударева Евгения Федоровича.

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

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

решение диссертационного совета от 15.10.2015 г., № 39

О присуждении **Шадрину Евгению Олеговичу**, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация **«Исследование бесконечных квазиодномерных систем в приближении сильной связи»** по специальности **01.04.02** – Теоретическая физика, принята к защите 07.07.2015 г., протокол № 29, диссертационным советом Д **212.267.07** на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации (634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, приказ о создании диссертационного совета № 798-745/68 от 13.04.2007 г.).

Соискатель **Шадрин Евгений Олегович**, 1989 года рождения.

В 2011 году соискатель окончил государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Марийский государственный университет».

В 2015 году соискатель очно окончил аспирантуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Марийский государственный университет».

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

Диссертация выполнена на кафедре физики и методики обучения физике федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Марийский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации и в 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» Министерства образования и науки Российской Федерации.

Научные руководители:

кандидат физико-математических наук, **Мурзашев Аркадий Ислибаевич**, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Марийский государственный университет», кафедра физики и методики обучения физике, доцент;

доктор физико-математических наук, **Мельникова Наталия Васильевна**, 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:

Килин Виктор Андреевич, доктор физико-математических наук, доцент, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», кафедра высшей математики, профессор

Дзедзашвили Дмитрий Михайлович, доктор физико-математических наук, федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики им. Л.Н. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук, лаборатория теоретической физики, ведущий научный сотрудник

дали положительные отзывы о диссертации.

Ведущая организация – федеральное государственное бюджетное учреждение науки **Институт проблем химической физики Российской академии наук**, г. Черноголовка Московской области, в своем положительном заключении, подписанном **Кареевым Иваном Евгеньевичем** (кандидат химических наук, лаборатория молекулярных проводников и магнетиков, заведующий лабораторией), указала, что актуальность данной работы заключается в необходимости теоретического исследования электронной структуры и оптических свойств таких материалов, как углеродные нанотрубки (УНТ), применение которых в высокотехнологичных отраслях промышленности и электроники позволит создать приборы нового поколения, обладающие более совершенными характеристиками. Исследование электронной структуры УНТ с помощью методов теории поля в статистической физике, проведенное в рамках приближения статических флуктуаций для модели Хаббарда, и анализ влияния параметров выбранной модели на электронную структуру, позволило сформулировать подход к анализу электронных спектров УНТ, не основанный на общепринятом «правиле кратности трем». К наиболее значимым результатам относятся вычисленные энергетические спектры и рассчитанные на их основе плотность состояний и спектр оптического поглощения для УНТ хиральностей (5,5), (9,0), (10,0), (10,10), (11,9), (12,8), (12,0) и (15,0), и вывод о том, что все рассмотренные УНТ являются узкозонными полупроводниками с шириной запрещенной зоны порядка 0.01-1.0 эВ. Показано, что учет кулоновского взаимодействия на одном узле приводит к разбиению энергетического спектра на две хаббардовские подзоны, а учет «дополнительных перескоков» электронов – к увеличению ширины хаббардовских подзон. Вычисленный объединенный спектр оптического поглощения УНТ хиральностей (10,10), (11,9) и (12,8) как наиболее распространенных в гетерогенных образцах трубок с весовым составом: (10,10) – 44 %, (11,9) – 30 % и (12,8) – 20 %, хорошо согласуется с соответствующей экспериментальной кривой, что позволяет говорить о хорошем качественном согласии полученных теоретических результатов и экспериментальных данных. Полученные результаты могут быть рекомендованы к использованию в научных

коллективах, работающих в области моделирования, синтеза и исследования углеродных нанотрубок и создания на их основе электронных устройств.

Соискатель имеет 14 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации – 11 работ, опубликованных в рецензируемых научных изданиях – 3 (все статьи опубликованы в российских журналах, переводные версии которых включены в Web of Science), в научном журнале – 1, в сборниках материалов международных и всероссийских научных конференций – 7. Общий объём публикаций – 1,92 п.л., авторский вклад – 0,95 п.л.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Мурзашев, А. И. Энергетический спектр и оптические свойства бесконечных углеродных нанотрубок в модели Хаббарда / А. И. Мурзашев, **Е. О. Шадрин** // Физика твердого тела. – 2012. – Т. 54, № 12. – С. 2359–2365. – 0.42 / 0.2 п.л.

2. Мурзашев, А. И. Энергетический спектр и оптические свойства одностенных углеродных нанотрубок / А. И. Мурзашев, **Е. О. Шадрин** // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2013. – Т. 56, № 7. – С. 62–69. – 0.38 / 0.2 п.л.

3. Мурзашев, А. И. Энергетический спектр и спектры оптического поглощения углеродных нанотрубок хиральности (10,10), (11,9), (12,8) / А. И. Мурзашев, **Е. О. Шадрин** // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2014. – Т. 145, № 6. – С. 1061–1071. – 0.64 / 0.3 п.л.

На автореферат поступило 5 положительных отзывов. Отзывы представили:

1. **В.П. Бубнов**, канд. техн. наук, ведущий научный сотрудник лаборатории молекулярных проводников и магнетиков Института проблем химической физики РАН, г. Черноголовка, *без замечаний*;
2. **А.Н. Пономарев**, канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник лаборатории физики нелинейных сред Института физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, *без замечаний*;
3. **Г.Л. Бухбиндер**, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры общей физики Омского государственного университета им. Ф.М. Достоевского, *без замечаний*;
4. **П.Э. Рубин**, доктор философии по физике (PhD in Physics), старший научный сотрудник Института физики Тартуского университета, Эстония, *без замечаний*;
5. **А.В. Попов**, канд. физ.-мат. наук, доцент, доцент кафедры современных

специальных материалов Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова, г. Барнаул, *с замечанием*: из автореферата не понятно, возможно ли в рамках предлагаемой модели учесть рассеяние электронов на примесях и различного рода структурных неоднородностях, характерных для реальных УНТ.

В отзывах отмечается, что основные результаты являются актуальными, поскольку могут быть использованы для интерпретации экспериментальных данных по таким новым материалам, как углеродные нанотрубки, а также для теоретического прогноза их электронных свойств. Фундаментальность полученных результатов состоит в том, что автором диссертационного исследования разработан новый подход к описанию электрических характеристик УНТ, не основанный на широко распространенном «правиле кратности трем»; полученные результаты могут быть использованы как в научных исследованиях, так и в условиях нанопроизводства.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что В.А. Килин является квалифицированным специалистом в области теоретических исследований оптических и спектроскопических свойств материалов; Д.М. Дзедзисашвили является известным специалистом в области теоретических исследований свойств материалов в рамках модели Хаббарда; в Институте проблем химической физики РАН работают квалифицированные специалисты по направлению 01.04.02 – Теоретическая физика, известные своими достижениями в области изучения электронной структуры и оптических свойств углеродных нанотрубок.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработан метод расчета энергетических спектров, плотности состояний и спектров оптического поглощения нанотрубок различных хиральностей как с учетом дальних перескоков электронов, так и без их учета;

предложен нетрадиционный подход к анализу электрических свойств нанотрубок, не основанный на общепринятом «правиле кратности трем», согласно которому тип проводимости определяется разностью хиральных индексов;

доказано, что нанотрубки следует рассматривать как систему с сильными корреляциями благодаря сильному кулоновскому взаимодействию π -электронов на одном узле, что приводит к расщеплению энергетического спектра на две хаббардовские подзоны. В результате этого «правило кратности трем» перестает действовать.

Теоретическая значимость исследований обоснована тем, что

доказано, что исследуемые системы необходимо изучать с учетом кулоновского взаимодействия на одном узле. Учет межэлектронного взаимодействия приводит к существенной перестройке энергетического спектра – образованию двух хаббардовских подзон, что влияет на соответствующие характеристики системы, зависящие от энергетического спектра – электропроводность и спектр оптического поглощения;

изложены результаты расчетов электронной структуры и спектров оптического поглощения нанотрубок различных хиральностей и проведен анализ влияния параметров выбранной модели на электронную структуру;

Значения полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что

разработан подход к анализу электронных спектров нанотрубок, не основанный на общепринятом «правило кратности трем»;

определено влияние параметров модели Хаббарда на результаты расчета электронной структуры углеродных нанотрубок;

представлены результаты по вычислению объединенного спектра оптического поглощения наиболее распространенных в гетерогенных образцах нанотрубок.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

идея базируется на классических представлениях теории поля в статистической физике и приближении статических флуктуаций для модели Хаббарда. Результаты получены благодаря корректной постановке задачи, выбору обоснованных физических моделей и приближений, высокой точности расчетов;

использовано сравнение и сопоставление результатов проведенных расчетов с экспериментальными данными и результатами расчетов других авторов;

установлены непротиворечивость и качественное согласие результатов проведенных расчетов с известными из литературы данными.

Научная новизна работы заключается в том, что предложен подход к расчету электронных спектров и спектров оптического поглощения углеродных нанотрубок на основе последовательного учета кулоновского взаимодействия электронов на одном узле, осуществленный в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций. Показано, что учет кулоновского взаимодействия приводит к существенной перестройке энергетического спектра, заключающегося в разделении всех зон на две группы – хаббардовские подзоны. Учет «дальних» перескоков приводит к увеличению ширины этих подзон. Обнаружено, что нанотрубки типа zig-zag не обладают металлической проводимостью, а являются узкозонными полупроводниками с шириной запрещенной зоны порядка 0.01-1 эВ. Впервые вычислены энергетический спектр, плотность состояний и спектр оптического поглощения для одиночных УНТ как с учетом «дальних» перескоков электрона, так и без его учета. На основе результатов, полученных для отдельных трубок, смоделирован спектр оптического поглощения гетерогенного образца, содержащего нанотрубки разных хиральностей.

Рекомендации об использовании результатов диссертационного исследования. Результаты работы могут быть полезны при разработке методов расчета электронных спектров и спектров оптического поглощения углеродных нанотрубок, фуллеренов и графена. Они представляют интерес для таких организаций как Национальный исследовательский Томский государственный университет, Институт физики прочности и материаловедения СО РАН (г. Томск), Институт проблем химической физики РАН (г. Черноголовка), Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Марийский государственный университет (г. Йошкар-Ола).

Личный вклад соискателя состоит в: непосредственном участии соискателя в получении и анализе данных по тематике диссертационного исследования, выполнении основной части теоретических расчетов; совместном с научными руководителями общем планировании работы и развитии выбранной модели, а также постановки задач, выборе направления исследований и интерпретации результатов расчетов, подготовке основных публикаций по выполненному исследованию.

Диссертация соответствует п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задачи по вычислению энергетического спектра, плотности электронных состояний и спектра оптического поглощения углеродных нанотрубок различных хиральностей в рамках модели Хаббарда, имеющей значение для развития теории о физических свойствах углеродных наносистем.

На заседании 15.10.2015 г. диссертационный совет принял решение присудить **Шадрину Е.О.** ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 19 человек, из них 7 докторов наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика, участвовавших в заседании, из 24 человек, входящих в состав совета, проголосовал: за – 19, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

И.о. председателя
диссертационного совета

Ученый секретарь
диссертационного совета



Дударев
Евгений Фёдорович
Киреева
Ирина Васильевна

15.10.2015 г.