

ОТЗЫВ

официального оппонента, к.ф.-м.н., заведующего учебно-научной лабораторией теоретической и прикладной нанотехнологии ГОУВМОМО «Московский государственный областной университет»
Чаусова Дениса Николаевича,
на диссертационную работу Ивлиева Павла Алексеевича
«Исследование магнитных и диэлектрических характеристик одностенных углеродных нанотрубок металлического типа методом функционалов плотности»,
представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»

Актуальность рецензируемой диссертационной **работы** определяется тем, что в ней впервые получены аналитическими методами сведения о магнитных и диэлектрических характеристиках одностенных углеродных нанотрубок металлического типа. Как известно, нанотрубки обладают разнообразными физико-химическими свойствами, определяющими их применение в качестве элементной базы современной наноэлектроники. Ранее в известных публикациях приводились, в основном, численные расчеты характеристик углеродных нанотрубок.

Структура диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка публикаций по теме диссертационного исследования и списка литературы. Общий объем составляет 100 страниц, включая 31 рисунок, 7 таблиц и список литературы из 155 наименований.

Во введении дана общая характеристика диссертационной работы, обоснована актуальность темы, выделены основные положения, составляющие ее научную новизну; сформулированы практическая значимость работы, ее цели и задачи, основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе приводятся сведения об аллотропных модификациях углерода. В первой части главы основное внимание уделено таким формам

существования углерода как фуллерены и графен. Приведен анализ механических и электрофизических свойств, а также приведены основные способы синтеза названных углеродных модификаций. Вторая часть главы посвящена детальному обзору углеродных нанотрубок. Рассмотрены наиболее распространенные методы синтеза, очистки и открытия концов нанотрубок. Приведены основные механические и электрофизические свойства углеродных нанотрубок металлического и полупроводникового типов, а также обоснованы перспективы применения в качестве элементной базы современной наноэлектроники.

Во **второй главе** обоснована актуальность изучения распределения электронной плотности нанотрубок в контексте их применения в качестве перспективного конструкционного материала для современной электроники. Обоснован выбор метода исследования и приведено его подробное описание, а также основные преимущества при решении многочастичных задач квантовой механики. Методами теории функционалов плотности произведен расчет радиального и углового распределений электронной плотности одностенных углеродных нанотрубок металлического типа, в приближении прямого кругового равномерно заряженного цилиндра. На основании полученного радиального распределения установлен характер проводимости углеродных нанотрубок металлического типа. В заключении главы автором проведено сравнение результатов аналитических решений с имеющимися в литературе экспериментальными данными и численными расчетами соответствующих величин, показывающее, что полученные результаты согласуются с известными данными.

В **третьей главе** автор произвел анализ имеющихся в литературе экспериментальных и теоретических сведений о магнитных свойствах углеродных нанотрубок в рамках которого установлено, что магнитные свойства могут использоваться как для контроля процесса получения нанотрубок с заданными характеристиками, так и для ориентации

нанотрубок в пространстве, благодаря которой их можно выстроить перпендикулярно относительно подложки. Указанные особенности, представляющие значительный научный интерес, могут быть положены в основу эффективного прикладного использования нанотрубок в различных областях науки и технологии, например, для магнитной записи высокой плотности, при создании полимерных и композиционных материалов с заданным магнитным откликом. В связи с тем, что на данный момент не существует единой теории описания магнитного взаимодействия одностенных углеродных нанотрубок металлического типа в текущей главе автором произведен расчет намагниченности нанотрубок исходя из полученных в предыдущей главе распределений электронной плотности в рамках приближения кольцевых молекулярных токов, применимость которого обоснована в работах Макаровой Т.Л. Приведен анализ зависимости намагниченности от электронной температуры и геометрических параметров углеродных нанотрубок.

Четвертая глава посвящена взаимодействию нанотрубок со внешним электромагнитным полем. Однослойные нанотрубки проявляют сильную нелинейность насыщающегося поглощения, т. е. они становятся прозрачными при достаточно интенсивном свете и могут быть использованы для различных приложений в области фотоники, например, в коммутаторах, маршрутизаторах и для регенерации оптических сигналов или формирования ультра-коротких лазерных импульсов. УНТ также имеют субпикосекундные времена релаксации и поэтому идеально подходят для сверхбыстрой фотоники. В связи с изложенным важным представляется расчет электронной плотности, диэлектрической проницаемости, показателя преломления, кинетической индуктивности и толщины скин-слоя углеродных нанотрубок, а также анализ зависимости указанных величин от геометрических параметров нанотрубок и характеристик внешнего электромагнитного излучения. Следует отметить согласованность

полученных автором значений показателя преломления и коэффициента поглощения с имеющимися экспериментальными значениями соответствующих величин, полученными двумя международными группами исследователей независимо. Результаты расчетов кинетической индуктивности и толщины скин-слоя, полученные автором диссертационного исследования на основании методов теории функционалов плотности согласуются с теоретическими предсказаниями других исследователей о наличии в углеродных нанобъектах подобного рода фотоэлектрических эффектов.

В **заключении** сформулированы основные результаты и выводы, выносимые на защиту.

Полученные диссертантом результаты и их трактовка имеют существенную **научную новизну**, теоретическую и практическую ценность. В частности, особый интерес представляют новые научные результаты:

— в рамках приближения кругового молекулярного тока получены радиальная и температурная зависимости намагниченности одностенных углеродных нанотрубок металлического типа, установлено, что у нанотрубок с хиральным индексом m более ста единиц намагниченность отсутствует;

— методами теории функционалов плотности произведен расчет диэлектрической проницаемости и показателя преломления нанотрубок;

— установлено, что электронный газ нанотрубок проявляет индуктивные свойства, которые зависят от диаметра нанотрубки, частоты и интенсивности излучения;

— установлено, что электромагнитное излучение терагерцового и видимого диапазона поглощается нанотрубками, а в радиодиапазоне исследованные объекты прозрачны.

В ходе выполнения диссертационной работы ее результаты были своевременно опубликованы и доложены на четырех Всероссийских и Международных конференциях. Основные **научные положения** достаточно

обоснованы в тексте диссертации. Они не противоречат существующим представлениям и литературным данным. Это позволяет заключить, что **результаты являются достоверными**.

Поставленные в работе задачи исследования решены, заявленная цель достигнута; при этом выводы соответствуют поставленной цели и решаемым задачам.

Опубликованные результаты и автореферат полностью отражают содержание диссертационной работы.

По диссертации Ивлиева Павла Алексеевича необходимо сделать следующие **замечания**:

1. В Таблице 1 приведены значения показателя преломления и коэффициента отражения с различной точностью.
2. За пределами внимания диссертанта осталось исследование взаимодействия углеродных нанотрубок с электромагнитными волнами, имеющими сферический фронт.
3. Требуется дополнительное пояснение тот факт, что согласно результатам расчетов нанотрубки кресельного типа обладают большей намагниченностью чем зигзагообразные.

Отмеченные в настоящем отзыве недостатки носят рекомендательный характер и не снижают научной ценности выполненной диссертантом работы.

Диссертация Ивлиева П.А. «Исследование магнитных и диэлектрических характеристик одностенных углеродных нанотрубок металлического типа методом функционалов плотности» выполнена на высоком научном уровне и является завершенным научно-квалификационным исследованием, развивающим актуальное научное направление. Проведенные исследования и полученные в диссертационной работе результаты в полной мере отвечают требованиям «Положения о

присуждении ученых степеней», утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013г., предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 — «Физика конденсированного состояния», а ее автор Ивлиев П.А. заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата физико-математических наук.

Как официальный оппонент диссертационной работы я, Чаусов Денис Николаевич согласен на обработку моих персональных данных.

Официальный оппонент

Заведующий научно-учебной лабораторией
теоретической и прикладной нанотехнологии
ГОУВМО «Московский государственный
областной университет»,
кандидат физико-математических наук
по специальности 01.04.07 — «Физика
конденсированного состояния»

_____ Чаусов Денис Николаевич

105005, г. Москва, ул. Радио, д. 10А

Телефон: (495) 780-09-43, доб. 1342

E-mail: office@mgou.ru

Подпись Чаусова Д.Н. удостоверяю:

*Начальник отдела кадров,
сотрудников и преподавателей*

Д.Н. Чаусов