

О Т З Ы В

официального оппонента, д.ф.–м.н., профессора ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» Иванова Вадима Константиновича

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»

Диссертация Ивлиева П.А. посвящена теоретическому исследованию радиально–углового распределения плотности электронов одностенных углеродных нанотрубок металлического типа и изучению их магнитных и диэлектрических свойств.

В последние десятилетия ежегодно возрастает интерес к теоретическим исследованиям различных свойств углеродных наноструктур. Это связано, главным образом, с тем, что уникальное сочетание физико–механических характеристик открывает углеродным наноструктурам широкий горизонт применения в качестве элементной базы современной электроники. Одним из наиболее важных с практической точки зрения объектов исследования являются углеродные нанотрубки, поскольку электрические, магнитные, оптические свойства углеродных нанотрубок делают их перспективным конструкционным материалом для создания электронных приборов нового поколения. В частности, усовершенствование технологий синтеза и очистки нанотрубок ведет к постепенному замещению ими кремния в качестве базы для современной наноэлектроники. С другой стороны, для практического применения необходимо понимать физические особенности, относящиеся не только к структуре этих элементов, но и к тем процессам, которые сопровождают их реакцию на внешние поля и воздействия. Для этого необходимо изучать электронные состояния в нанотрубках, а также рассматривать механизмы взаимодействия электронов с электромагнитными полями. Учет вклада электронов в эти процессы является непростой задачей и, несмотря на интенсивные исследования, в последние годы по-прежнему

недостаточно изучен. В диссертационной работе Ивлиева П.А. методами теории функционалов плотности проведено исследование взаимодействия электронного газа одностенных углеродных нанотрубок металлического типа с внешним электромагнитным возмущением, рассчитаны значения показателя преломления и коэффициента отражения. Поэтому тема диссертационной работы Ивлиева П.А. является несомненно актуальной.

Диссертация Ивлиева П.А. состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Общий объем составляет 106 страниц, включая 31 рисунок, 7 таблиц и список литературы из 166 наименований.

Во Введении обоснована актуальность темы диссертационного исследования, а также сформулированы цели и приведены основные результаты работы.

Первая глава посвящена обзору аллотропных модификаций углерода. В первой части главы приведен анализ механических и электрофизических свойств аллотропных наномодификаций углерода. Во второй части рассматриваются наиболее распространенные методы синтеза и очистки углеродных нанотрубок и возможности их применения в качестве элементной базы современной наноэлектроники.

Во второй главе автор, пользуясь методами теории функционала плотности, исследует пространственное распределение электронной плотности в одностенных углеродных нанотрубках. Нанотрубка рассматривается как полый тонкостенный, равномерно заряженный цилиндр, причём, ввиду того, что её длина много больше диаметра, цилиндр является бесконечно длинным. Потенциал цилиндрического слоя считается периодическим в направлении оси цилиндра. В рамках такого подхода автору удалось получить аналитическую функцию, описывающую распределение электронной плотности. Проведенный анализ радиального распределения показывает, что с уменьшением диаметра нанотрубки растёт плотность вероятности обнаружения частицы внутри трубки. Результаты по распределению электронной плотности представляют значительный интерес,

поскольку, если основная доля переносчиков заряда сосредоточена в области, отстоящей от центра трубки не более чем на половину диаметра и, соответственно, слабо взаимодействует с основанием нанотрубки, то в таких условиях проводимость образца носит баллистический характер.

В третьей главе производится расчет намагниченности углеродных нанотрубок в рамках модели кругового молекулярного тока. Показано, что намагниченность быстро уменьшается с ростом хирального индекса. Полученные результаты находятся в соответствии с имеющимися в литературе качественными экспериментальными данными.

Взаимодействие внешнего электромагнитного поля с нанотрубкой рассматривается в четвертой главе диссертации и проводится оно в рамках модели отклика двумерного электронного газа, находящегося во внешнем цилиндрически симметричном потенциале. Для этого в функционал плотности автор вводит слагаемое, описывающее взаимодействие электронного газа с внешним электромагнитным полем, и получает вариационное уравнение для определения отклика плотности. Результаты произведенного расчета сравниваются с экспериментальными данными в видимом, ультрафиолетовом и инфракрасном диапазоне спектра. Отмечается, что результаты расчетов с большой степенью точности согласуются с имеющимися в литературе экспериментальными данными.

В Заключении автором сформулированы основные результаты диссертационной работы.

Остановливаясь на работе в целом, следует отметить, что автором, П.А. Ивлиевым, проделана большая работа, получен целый ряд новых, практически важных результатов, часть которых представляет большой методический интерес. К основным новым результатам и достижениям автора можно отнести следующие результаты.

Впервые в рамках методов теории функционалов плотности получена аналитическая функция пространственного распределения электронной плотности одностенных углеродных нанотрубок. На основании полученных

аналитических распределений впервые предложена оценка потенциальных магнитных свойств нанотрубок. Обнаружено, что электронный газ углеродных нанотрубок обладает кинетической индуктивностью, величина которой зависит от геометрических параметров трубки, а также от характеристик внешнего электромагнитного воздействия. Все приведенные данные свидетельствуют о том, что результаты диссертации являются новыми и оригинальными.

Достоверность основных полученных результатов обоснована надежностью применявшихся аналитических методов, согласием с теоретическими и экспериментальными результатами, полученными другими авторами, в том числе международными коллективами. Следует отметить воспроизводимость результатов, полноту приведенных данных и их соответствие имеющимся в литературе данным, в частности, в разделе, посвященном исследованию показателя преломления и коэффициента отражения углеродных нанотрубок. В ходе выполнения диссертационной работы ее результаты были своевременно представлены на международных и всероссийских конференциях.

Развитые в диссертационной работе методы могут быть использованы при изучении магнитных, диэлектрических и индуктивных характеристик наноструктур. Результаты настоящего исследования могут быть положены в основу расчета наноразмерных электронных устройств хранения данных, а также могут быть использованы при разработке эффективных антенн и поглотителей электромагнитного излучения заданного диапазона.

Стоит отметить, что автор проделал большой объем работы. Все результаты диссертации опубликованы и представлены на ряде международных конференций. Однако к рецензируемой работе можно сделать несколько замечаний, которые бы хотелось отметить.

1. Полученные в работе распределения электронных плотностей зависят от диаметра нанотрубок. С другой стороны, функционал плотности,

используемый автором, использовался в рамках упрощенной модели нанотрубок. В работе не приводятся сравнений с более точными квантово-химическими расчетами плотностей и функций отклика для рассматриваемых автором типов нанотрубок. Представляется важным провести такое сравнение, что увеличило бы значимость выполненной работы.

2. При расчете кинетической индуктивности (глава 4) автор исследует ее зависимость от размера нанотрубок и интенсивности излучения, но при этом ограничивается одной частотой излучения 550 ТГц. Автору следовало обосновать выбор частоты, а также пояснить на основании полученных формул, как меняется кинетическая индуктивность с ее изменением.
3. В диссертации не хватает сравнения рассчитанных значений кинетической индуктивности с экспериментальными данными соответствующей величины.

Отмеченные в данном отзыве замечания не снижают научной ценности и обоснованности основных положений диссертационной работы и носят рекомендательный характер.

Автореферат и опубликованные работы в журналах, входящих в перечень рекомендованных ВАК, полностью соответствуют содержанию диссертации и полностью раскрывают ее основные научные положения.

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, Иванов Вадим Константинович, согласен на обработку моих персональных данных.

Официальный оппонент

Профессор кафедры экспериментальной физики
ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский
политехнический университет Петра Великого»,
д. физ.-мат. наук по специальности
01.04.02 – «Теоретическая физика»

_____ Иванов В. К.

Почтовый адрес: 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, 29.

Телефон: 8 (800) 707-18-99.

E-mail: office@spbstu.ru

Подпись Иванова В.К. удостоверяю:

