На правах рукописи

Назарова Татьяна Эдуардовна

ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК И ФУЛЛЕРЕНОВ КАК СИСТЕМ С СИЛЬНЫМИ КОРРЕЛЯЦИЯМИ

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Томск – 2017

Работа выполнена в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» на кафедре физики металлов физического факультета и в лаборатории новых материалов и перспективных технологий Сибирского физико-технического института имени академика В.Д. Кузнецова.

Научные руководители: кандидат физико-математических наук, доцент
Мурзашев Аркадий Ислибаевич

доктор физико-математических наук
Мельникова Наталия Васильевна

Официальные оппоненты:

Дзебисашвили Дмитрий Михайлович, доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук», лаборатория теоретической физики обособленного подразделения – Института физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук, ведущий научный сотрудник

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

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского»

Защита состоится 26 октября 2017 г. в 16 час. 00 мин. на заседании диссертационного совета Д 212.267.07, созданного на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина 36 (главный корпус СФТИ ТГУ, аудитория 211).

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке и на официальном сайте федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» www.tsu.ru.

Материалы по защите диссертации размещены на официальном сайте ТГУ: http://www.ams.tsu.ru/TSU/QualificationDep/co-searchers.nsf/newpublicationn/NazarovaTE26102017.html

Автореферат разослан «___» сентября 2017 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Киреева Ирина Васильевна

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Фуллерены и углеродные нанотрубки (УНТ), открытые на рубеже 80-х и 90-х годов прошлого века [1,2] в силу уникальности своих свойств без преувеличения являются одними из самых перспективных материалов и основой для будущих технологий. Фуллерены применяются в медицине и биологии, в частности, с их помощью усиливают эффективность вакцин и вирусных препаратов. В области энергетики проводятся исследования по разработке накопителей водорода на основе фуллеренов и УНТ. В области энергетики фуллерены и УНТ могут быть использованы для создания накопителей водорода. Недавно был изобретен фуллерен-кислород-йодный лазер [3], который может быть использован для прямого преобразования солнечной энергии в лазерное излучение. Этот лазер может обеспечить передачу солнечной энергии на большие расстояния с высоким КПД. Фуллерены и содержащие их материалы могут быть использованы в качестве присадок к консистентным смазкам. С помощью введения в полимерное связующее полиэдральной многослойной углеродной наноструктуры фуллероидного типа разрабатываются материалы с улучшенными свойствами скольжения. В металлургии фуллерены и их соединения используются для упрочнения сталей – особый интерес представляет синтез фуллеренов и их соединений в структуре железоуглеродистых сплавов. Исследуются закономерности формирования фуллерен содержащих фаз в материалах, полученных методом порошковой металлургии. Уникальные оптические и электропроводящие свойства УНТ и фуллеренов и их чувствительность к внешнему воздействию сулят большие перспективы в области создания элементной базы для микроэлектроники.

Особенность электронного строения фуллеренов и УНТ состоит в том, что углерод в этих соединениях находится в sp^2-гибридизированном состоянии. Три гибридных орбитали образуют σ - связи, которые формируют остов системы, ее каркас, а четвертная негибридная орбиталь формирует частично

делокализованные электронные состояния, называемые π-состояниями. Эти π-состояния и определяют весь спектр уникальных электронных свойств рассматриваемых систем.

До недавнего времени считалось, что электронное строение фуллеренов и УНТ изучено достаточно хорошо. Так энергетический спектр первого синтезированного фуллерена C_{60} был вычислен еще до его открытия [4]. Энергетический спектр УНТ вычислен на следующий год после их открытия [5]. Оба этих расчета были выполнены в предположении, что π-электроны, формирующие зоны близи уровня Ферми, являются частично локализованными, так что их можно описывать гамильтонианом Хюккеля, в котором, как известно, учитывается только один процесс – перескоки электронов на соседние узлы. По результатам этих работ было сделано несколько заключений и предположений об электронном строении рассматриваемых систем. В частности, для УНТ было сформулировано «правило кратности трем», согласно которому их электропроводящие свойства критическим образом зависят от хиральности УНТ (способа сворачивания углеродной плоскости в цилиндр). Согласно этому правилу, УНТ с индексами хиральности (n,m) по типу проводимости являются металлами, если разность этих индексов кратна трем, и диэлектриками или полупроводниками в противном случае.

Последующий опыт экспериментального изучения фуллеренов и УНТ не смог подтвердить предсказания и выводы, сделанные на основе первых расчетов электронного строения этих систем. Наоборот, с каждым годом появляется все больше и больше экспериментальных свидетельств о том, что электронное строение УНТ и фуллеренов гораздо сложнее, чем предполагалось. Достаточно обширный анализ экспериментальных работ по УНТ и фуллеренам представлен в обзорах [6,7].

На наш взгляд, несогласие теоретических предсказаний с полученными экспериментальными данными связано с тем, что при расчете энергетического спектра в [4,5] и в последующих работах, основанных на [4,5], не учитывалось кулоновское взаимодействие электронов на одном узле. А ведь еще в начале 70-х

годов Левиным [8] на примере углеродной плоскости было показано, что в системах, где углерод находится в *sp2*-гибридизированном состоянии, кулоновское взаимодействие электронов на одном узле велико и может достигать значений ~ 10 эВ. Поздние, более точные расчеты [9] подтвердили этот вывод. Известно, что в системах с таким сильным кулоновским взаимодействием возникает так называемое сильно коррелированное состояние [10]. Следовательно, энергетический спектр фуллеренов и УНТ необходимо вычислять с учетом сильного кулоновского взаимодействия π-электронов на одном узле.

Из вышесказанного следует, что изучение электронной структуры фуллеренов и УНТ с учетом сильного кулоновского взаимодействия π-электронов на одном узле является очень актуальной задачей. Последовательно эта задача может быть решена в рамках модели Хаббарда [11], которая хорошо зарекомендовала себя при изучении электронных свойств в системах с сильными корреляциями.

Степень разработанности темы определяется наличием большого массива экспериментальных данных по электронной структуре исследуемых систем, которые требуют теоретического описания, а также существованием хорошо себя зарекомендовавшей модели Хаббарда, в рамках которой возможно последовательно учесть кулоновское взаимодействие электронов на одном узле при вычислении энергетического спектра углеродных наносистем.

Цель и задачи работы состоят в теоретическом исследовании влияния сильно коррелированных электронных состояний на механизм и характер перестройки электронной структуры фуллеренов C_{72} и C_{74}, а также кластеров углеродной нанотрубки хиральности (5,5), и, как следствие, на формирование оптических свойств исследуемых систем, для чего необходимо:

1. Разработать в рамках модели Хаббарда методы вычисления энергетического спектра фуллеренов и углеродных нанотрубок с учетом сильной корреляции π-электронов.

2. Для получения спектров оптического поглощения фуллеренов C_{72} и C_{74} определить правила отбора для оптических переходов между энергетическими уровнями.

3. Применить разработанные методы для вычисления энергетических спектров и спектров оптического поглощения фуллеренов C_{72} и C_{74} и эндоэдральных комплексов на их основе. Проанализировать изменение оптических свойств эндоэдральных комплексов, вызванное сильно коррелированным электронным состоянием, в зависимости от валентности внедренного атома и провести сравнительный анализ рассчитанных спектров со спектрами, полученными экспериментально.

4. Вычислить с помощью разработанных методик энергетические спектры кластеров углеродной нанотрубки хиральности (5,5), состоящих из разного числа атомов. Исследовать влияние размера кластера нанотрубки на величину щели между нижней заполненной молекулярной орбиталью (НЗМО) и верхней незаполненной молекулярной орбиталью (ВНМО), ширину верхней и нижней хаббардовских подзон и среднюю энергию, приходящуюся на один атом.

5. При расчете средней энергии атомов в кластерах углеродной нанотрубки определить условия, когда синтез нанотрубки становится энергетически более выгодным, чем свертывание графена в фуллерен.

Научная новизна:

1. В работе впервые изучено влияние сильно коррелированных электронных состояний на механизм и характер перестройки электронной структуры фуллеренов C_{72} и C_{74}, а также кластеров углеродной нанотрубки хиральности (5,5), состоящих из различного числа атомов (30, 50, 70, 90 и 190). Показано, что электронный спектр фуллеренов и нанотрубок благодаря сильному кулоновскому взаимодействию разделяется на две хаббардовские подзоны с образованием щели, которая может достигать значений ~ 1 эВ. На основании этого делается вывод о том, что нанотрубки хиральности (5.5) по своим электропроводящим свойствам являются полупроводниками, а не металлами, как следует из работы [4].

2. Впервые проведено исследование роли сильного кулоновского взаимодействия в формировании оптических свойств фуллеренов C_{72} и C_{74}. Полученные в приближении молекулярных орбиталей спектры оптического поглощения фуллеренов C_{72} и C_{74}находятся в хорошем качественном согласии с экспериментальными данными, представленными в независимых источниках по данной тематике.

3. Впервые проанализирован характер изменения основных параметров электронной структуры кластеров УНТ хиральности (5,5), таких как ширина хаббардовских подзон, щель между занятыми и вакантными уровнями, корреляционные функции и средняя энергия на один атом, с изменением количества атомов в них. Показано, что зависимость средней энергии на атом от числа атомов в кластере в области ~60-70 атомов имеет максимум. Это позволяет предположить, что при росте УНТ кластеры, состоящие из 60-70 атомов, могут с равной вероятностью образовать фуллерены C_{60} или продолжать расти дальше - до УНТ, имеющих макроскопическую длину. Если в этот момент прекратить подвод к системе энергии, то кластеры УНТ указанных размеров релаксируют, образуя фуллерены C_{60}. Если подвод энергии не прекращать, то УНТ будут расти до тех пор, пока растущая УНТ не встретит препятствие, что и наблюдается в эксперименте [12].

Теоретическая и практическая ценность работы определяется тем, что созданные и верифицированные в ней новые представления о влиянии сильного кулоновского взаимодействия на электронную структуру и оптические свойства фуллеренов и углеродных нанотрубок вносят вклад в развитие физических представлений о природе электронного строения и свойств углеродных наноструктур и позволяют существенно повысить точность расчетов электронных характеристик исследуемых материалов. В частности, опираясь на новые представления, возможно предсказывать вид проводимости в наноматериалах в зависимости от различных факторов, оценивать значения некоторых электронных характеристик исследуемых систем, что является актуальным при их

практическом применении, например, в наноэлектронике. В диссертации также доказывается, что электронную структуру фуллеренов и кластеров УНТ необходимо изучать с учетом сильного кулоновского взаимодействия, что позволяет описать механизм и характер перестройки электронной структуры фуллеренов и углеродных нанотрубок. Это существенным образом сказывается на таких важнейших характеристиках любой конденсированной системы, как электропроводность и спектр оптического поглощения. Хорошее согласие рассчитанных в диссертации спектров оптического поглощения фуллеренов C_{72} и C_{74} с соответствующими экспериментальными данными позволяет нам настаивать на необходимости изучать фуллерены и УНТ с учетом сильной корреляции π-электроновв рамках модели Хаббарда. Полученные в работе спектры могут быть использованы при создании на основе изученных фуллеренов различных электронных и оптических устройств.

Результаты исследований спектров кластеров УНТ показывают, что общепринятое «правило кратности трем» не является таким уж бесспорным, как это следует из результатов работы [5]. Данные результаты могут быть использованы при изучении процессов синтеза фуллеренов и УНТ, а выявленные механизмы изменения электронных свойств углеродных наносистем с ростом числа атомов в кластерах являются полезными при создании новых и совершенствовании уже имеющихся методов синтеза фуллеренов и УНТ.

Методология и методы.

При проведении диссертационных исследований использовались методы квантовой теории поля в статистической физике и приближение статических флуктуаций для модели Хаббарда, наиболее последовательно описывающей системы с сильным кулоновским взаимодействием электронов на одном узле. Для описания спектров оптического поглощения фуллеренов использовалось приближение молекулярных орбиталей.

Положения, выносимые на защиту:

1. Предложена физическая модель для теоретического описания механизма и характера изменений электронной структуры и оптических свойств фуллеренов

C_{72} и C_{74}, а также кластеров углеродной нанотрубки хиральности (5,5), которая основана на приближении статических флуктуаций для модели Хаббарда, в рамках которой учтено влияние сильных корреляцийπ-электронов.

2. Разработана методика расчета энергетического спектра фуллеренов C_{72} и C_{74} и кластеров углеродной нанотрубки хиральности (5,5), с учетом сильного кулоновского взаимодействия. Получены правила отбора для оптических переходов между энергетическими уровнями, с помощью которых построены спектры оптического поглощения фуллеренов C_{72} и C_{74}.

3. Показано, что энергетические спектры фуллеренов C_{72} и C_{74} и кластеров углеродной нанотрубки хиральности (5,5), состоящих из 30, 50, 70, 90 и 190 атомов, вследствие сильных корреляций π-электронов разбивается на две группы уровней – хаббардовские «верхнюю» и «нижнюю» подзоны, которые и формируют энергетическую щель~1 эВ.

4. Обнаружено, что в случае, когда число электронов равно числу узлов, средние значения чисел заполнения электронами неэквивалентных узлов одинаковы. При невыполнении этого условия средние значения чисел заполнения существенно различаются и немонотонно изменяются вдоль длины нанотрубки.

5. Показано, что рост УНТ при синтезе идет как конкуренция между процессами дальнейшего роста нанотрубки и свертывания растущих кластеров в фуллерены с числом атомов, равным 60-70.

Степень достоверности полученных результатов определяется корректной постановкой решаемых задач и их физической обоснованностью, применением современных методов расчета, а также хорошим качественным согласием полученных результатов с экспериментально полученными данными, опубликованными в открытых источниках.

Апробация результатов.

Материалы диссертации докладывались и обсуждались на 3 всероссийских научных конференциях, таких как IV Всероссийская конференция по наноматериалам, Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова

РАН (Москва, 1-4 марта 2011 г.); XVIII Всероссийская конференция «Структура и динамика молекулярных систем», Казанский (Поволжский) федеральный университет (Яльчик - 2011 г.); XLVII Школа по физике конденсированного состояния, ФГБУ «ПИЯФ» (Санкт-Петербург – 2013 г.).

Личный вклад автора. Личный вклад автора заключается в вычислении под руководством научных руководителей энергетического спектра фуллеренов C_{72}, C_{74} и кластеров УНТ хиральности (5,5), содержащих 30, 50, 70, 90 и 190 атомов. Автором на основе энергетических спектров, полученных для фуллеренов C_{72} и C_{74}, было лично выполнено вычисление спектров оптического поглощения. Анализ полученных результатов и сравнение с соответствующими экспериментальными данными автор проводил совместно с научными руководителями. Все опубликованные статьи и тезисы докладов автором написаны под руководством научных руководителей.

Публикации. Результаты исследований опубликованы в четырех статьях, включенных в перечень изданий, рекомендованных ВАК, и 7 тезисах и статьях в сборниках.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, одного приложения и списка литературы из 104 наименований. Работа изложена на 121 страницах машинописного текста, содержит 42 рисунка.

Содержание работы

Во введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

В первой главе «Структура и электронное строение фуллеренов и углеродных нанотрубок. Эксперимент и теория» даются основные сведения об углеродных наносистемах, фуллеренах и УНТ, их свойствах, методах получения и исследования. На основе анализа литературных данных приводится описание основных результатов экспериментального и теоретического изучения этих

систем. Описываются методы, с помощью которых получены теоретические результаты, касающиеся их электронного строения. Показывается, что существующие в настоящее время теоретические работы по вычислению энергетического спектра не могут объяснить весь спектр экспериментальных данных по электронным и оптическим свойствам фуллеренов и УНТ. Исходя из результатов работ [8,9], где показано, что в углеродных системах с sp^2 гибридизацией кулоновское взаимодействие π-электронов велико, делается вывод, что для корректного изучения фуллеренов и УНТ необходимо применять модель Хаббарда. Далее обсуждаются методы получения результатов в рамках этой модели, и показывается, что наиболее оптимальным для решения рассматриваемых в диссертации задач является применение приближения статических флуктуаций [13-15]. Дается описание метода расчета энергетического спектра в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций, который был предложен Мироновым Г.И. [14].

Метод статических флуктуаций, впервые предложенный Нигматуллиным в работе [15] для модели Изинга, Мироновым был распространен на модель Хаббарда:

$$H = \varepsilon \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} + B \sum_{i,j,\sigma} (a_{i\sigma}^{+} a_{j\sigma} + a_{j\sigma}^{+} a_{i\sigma}) + U \sum_{i,\sigma} n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \qquad (1)$$

здесь $a_{i\sigma}^{+}, a_{i\sigma}$ операторы рождения и уничтожения соответственно электронов со спином σ на узле *i*, $n_{i,\sigma} = a_{i\sigma}^{+} a_{i\sigma}$ –оператор числа электроном со спином σ на узле *i*, ε – собственная энергия электрона, *B* – интеграл перескока электронов между соседними узлами, *U* – кулоновский интеграл, характеризующий взаимодействие двух электронов на одном узле. В рамках приближения статических флуктуаций, пишется уравнение движения для операторов $a_{i\sigma}^{+}(\tau)$

$$\frac{da_{f\sigma}^{+}(\tau)}{d\tau} = \varepsilon_{f,\sigma} a_{fi\sigma}^{+}(\tau) + B \sum_{j \neq f}^{N} a_{j\sigma}^{+}(\tau) + U n_{f,\bar{\sigma}}(\tau) a_{f\sigma}^{+}(\tau) \qquad (2)$$

Переходя к новому представлению операторов $\tilde{a}_{i\sigma}^{+}$ и $\Delta\tilde{n}_{i\bar{\sigma}}$:

$$a_{i\sigma}^{+}(\tau) = \exp(H_0 \tau) \tilde{a}_{i\sigma}^{+}(\tau) \exp(-H_0 \tau) \qquad (3)$$

$$\Delta n_{i\bar{\sigma}}(\tau) = \exp(H_0\tau)\tilde{a}^{+}_{i\sigma}\Delta\tilde{n}_{i\bar{\sigma}}(\tau)\exp(-H_0\tau),$$

где

$$H_0 = \sum_{i,\sigma}\varepsilon_{i\sigma}n_{i,\sigma} + B\sum_{i,j,\sigma}(a^{+}_{i\sigma}a_{j\sigma} + a^{+}_{j\sigma}a_{i\sigma}),$$

получим:

$$\frac{d\tilde{a}^{+}_{i\sigma}(\tau)}{d\tau} + \left[H_0, \tilde{a}^{+}_{i\sigma}(\tau)\right] = \varepsilon_i\tilde{a}^{+}_{i\sigma}(\tau) + \sum_{j\neq i,\sigma}^{N} B\tilde{a}^{+}_{j\sigma}(\tau) + U\tilde{a}^{+}_{i\sigma}(\tau)\Delta\tilde{n}_{i\bar{\sigma}}, \qquad (4)$$

здесь $\Delta\hat{n}_{i\bar{\sigma}} = \langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle - \Delta n_{i\bar{\sigma}}$, а $\varepsilon_i = \varepsilon + U\langle n_{i,\bar{\sigma}}\rangle$.

На этом этапе, полагая $[H_0, H] \approx 0$, что, согласно [15], равносильно:

$$\frac{d\Delta\tilde{n}_{i\bar{\sigma}}(\tau)}{d\tau} = 0 \quad , \qquad (5)$$

получаем:

$$\frac{d\tilde{a}^{+}_{i\sigma}(\tau)}{d\tau} \approx U\tilde{a}^{+}_{i\sigma}(\tau)\Delta\tilde{n}_{i\bar{\sigma}} \qquad (6)$$

Совместное решение (5) и (6) с учетом $(n_{i,\sigma})^2 = n_{i,\sigma}$ дает:

$$\tilde{a}^{+}_{i\sigma}(\tau) = a^{+}_{i\sigma}(0)\Delta n_{i\bar{\sigma}}(0)(e^{U(1-n)\tau} - e^{-U\tau n}) + a^{+}_{i\sigma}(0)(ne^{U(1-n)\tau} + (1-n)e^{-U\tau n}) \qquad (7)$$

Переходя от операторов с тильдой к операторам в представлении Гейзенберга и учитывая, что в дальнейшем средние от слагаемых ~ $\Delta n_{i\bar{\sigma}}(0)$ дают нуль, получаем:

$$a^{+}_{k\sigma}(\tau) = \bar{a}^{+}_{k\sigma}(\tau)(ne^{U(1-n)\tau} + (1-n)e^{-U\tau n}), \qquad (8)$$

где $n = \langle n_{i,\bar{\sigma}}\rangle$. В (8) $\bar{a}^{+}_{k\sigma}(\tau) = e^{H_0\tau}a^{+}_{k\sigma}(0)e^{-H_0\tau}$. Таким образом, для того чтобы найти $a^{+}_{i\sigma}(\tau)$, взятые в представлении Гейзенберга из выражения (8), необходимо знать выражения операторов $\bar{a}^{+}_{k\sigma}(\tau)$. Эти выражения легко получаются, если написать для них уравнения движения:

$$\frac{d\bar{a}^{+}_{k\sigma}(\tau)}{d\tau} = \varepsilon_k\bar{a}^{+}_{k\sigma}(\tau) + B\sum_{j\neq k}\bar{a}^{+}_{j\sigma}(\tau) \qquad (9)$$

Из выражения для оператора $a_{i\sigma}^{+}(\tau)$ в представлении Гейзенберга легко вычисляется временная функция Грина: $G_{i\sigma}(\tau)=\left\langle\left[a_{i\sigma}^{+}(\tau),a_{i\sigma}\right]_{+}\right\rangle$. Выражение для просуммированной по всем узлам ФГ $G_{\sigma}(\tau)=\sum_{i=1}^{N}G_{i\sigma}(\tau)$ в рамках описанного приближения имеет вид:

$$G(\tau)=\sum_{k=1}^{Q}M_k e^{E_k\tau}\,, \tag{10}$$

а её Фурье-образ:

$$G(\omega)=\frac{i}{2\pi}\sum_{k=1}^{Q}\frac{M_k}{\omega-E_k} \tag{11}$$

Видно, что E_k – энергии уровней, а M_k – кратности их вырождения. Параметр ε вычисляется из закона сохранения частиц, который записывается в виде:

$$N=\sum_{k=1}^{Q}M_k f(E_k) \tag{12}$$

В [14] Мироновым было показано, что в случае, когда число частиц равно числу узлов, $\varepsilon=-U/2$. Таким образом, приближение статических флуктуаций позволяет достаточно просто получить энергетический спектр систем, описываемых моделью Хаббарда. Очевидно, что применимость этого приближения ограничивается тем, что на этапе написания (4) мы фактически произвели расцепление, положив $[H_0,H]\approx 0$. Это очевидно означает, что мы пренебрегаем процессами с переворотом спина, ведущими к кондовским аномалиям, которые имеют место при низких температурах. Исходя из этого, мы полагаем, что приближение статических флуктуаций справедливо при температурах, много больших температуры Кондо. Все результаты, представленные в диссертации, получены в приближении статических флуктуаций, следовательно, они применимы в области температур ~ нескольких сотен *K*.

Вторая глава «Энергетический спектр и спектры оптического поглощения фуллеренов C_{72} и C_{74} и эндоэдральных комплексов на их основе»

посвящена расчетам энергетического спектра фуллеренов C_{72} и C_{74} и их спектров оптического поглощения. Результаты расчета показывают, что энергетический спектр исследуемых фуллеренов вследствие кулоновского взаимодействия претерпевает существенную перестройку, которая заключается в разбиении энергетического спектра системы на две хаббардовские подзоны. Нижняя хаббардовская подзона содержит уровни с отрицательными значениями энергии, даваемые выражениями вида $E_j = \alpha_j B + \varepsilon$. Здесь α_j - числа, а ε - собственная энергия электронов, которая примерно равна–*U/2*, где *U* – интеграл кулоновского взаимодействия электронов на одном узле. Анализ показывает, что эти состояния соответствуют случаю однократного занятия электронами узлов системы. Уровни с положительными значениями энергии - $E_j = \alpha_j B + \varepsilon + U$, относящиеся к верхней хаббардовской подзоне, соответствуют случаю двукратного занятия узлов электронами. В результате, каждый энергетический уровень E_k занят не $2M_k$ (здесь M_k - кратность вырождения уровня) электронами: M_k со спином «вверх» и M_k со спином «вниз», а M_k электронами с произвольной ориентацией спина. В этом и заключается главная особенность сильно коррелированных систем [16]. В отличие от систем, где нет сильной корреляции, в рассматриваемом случае оказывается занятой не половина нижней хаббардовской подзоны, а вся нижняя хаббардовская подзона. И поэтому положение щели между занятыми и вакантными состояниями оказывается выше, чем если бы в системе не было сильных корреляций, обусловленных кулоновским взаимодействием π-электронов. В химии эта щель называется щелью между нижней вакантной молекулярной орбиталью и верхней занятой молекулярной орбиталью (НВМО-ВЗМО). Таким образом, занятой оказывается не половина нижней хаббардовской подзоны, а вся нижняя хаббардовская подзона. Вследствие этого положение щели НВМО-ВЗМО в нашем случае оказывается выше, чем, если бы в системе не было сильных корреляций, обусловленных кулоновским взаимодействием π-электронов.

В системах с сильными корреляциями, к которым из-за сильного кулоновского взаимодействия относится π-электронная подсистема фуллеренов, щель НВМО-ВЗМО есть расстояние между нижней и верхней хаббардовскими подзонами. Для фуллерена C_{72}, как следует из результатов расчета, приведенного в главе 2, эта щель равна разности между интегралом кулоновского отталкиванияU и шириной хаббардовской подзоны W:$\Delta=U-W\approx1.368$ эВ. Все вышесказанное продемонстрировано на рисунке 1, где схематично изображен энергетический спектр фуллерена C_{74}.

Анализ полученных в данной главе энергетических спектров фуллеренов C_{72} и C_{74} показывает, что щель НВМО-ВЗМО в фуллерене C_{72} составляет 1.368эВ, а в фуллерене C_{74} – 1.268 эВ. Этот результат отличается от результатов расчетов, выполненных в [17,18]. Особенно большое отклонение имеет место для фуллерена C_{74}, для которого, согласно [18], эта щель равна нескольким сотым эВ. Это отклонение есть следствие того, что в [17,18] при расчетах не учитывалось кулоновское взаимодействие электронов на одном узле.

На основе полученных энергетических спектров в приближении молекулярных орбиталей [19] вычислен также спектр оптического поглощения эндоэдральных комплексов на основе фуллеренов C_{72} и C_{74}. Расчет оптических спектров в работе выполнен именно для эндоэдральных комплексов потому, что указанные фуллерены в чистом виде являются неустойчивыми и существуют лишь в виде эндоэдральных металлофуллеренов $Ca@C_{72}$ и $Eu@C_{74}$, $Sc@C_{74}$, $Sc_2@C_{74}$, $Ca@C_{74}$, $Yb@C_{74}$ и $Ba@C_{74}$, спектры оптического поглощения которых измерены в [20,21].

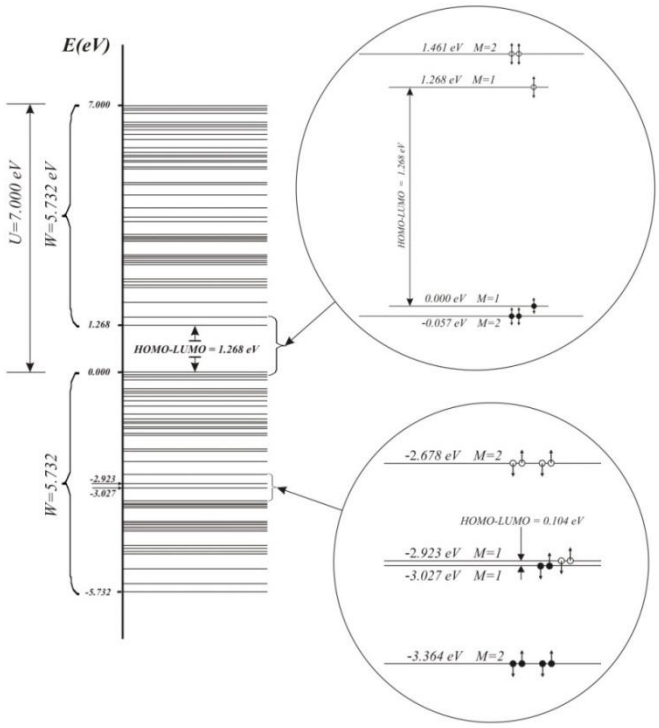


Рисунок 1– Энергетический спектр фуллерена C_{74}. Заполненными кружками обозначены занятые состояния, пустыми – вакантные состояния

С большой степенью точности можно считать [22], что внедрение внутрь фуллерена атомов металла существенно не влияет на энергетический спектр. И в этом случае внедрение атомов может быть учтено добавлением в электронную структуру лишних электронов, равных число электронов N_e металла, перешедших в фуллереновую оболочку.

Полученные спектры оптического поглощения приведены на рисунке 2 и 3. Видно, что экспериментальные кривые достаточно хорошо совпадают с теоретическими кривыми, полученными в диссертации. Отметим, что результаты расчетов, представленные в данной главе диссертации, впервые позволили получить теоретические кривые спектра оптического поглощения исследуемых фуллеренов, совпадающие с экспериментальными данными. Это позволяет нам сделать вывод о том, что в исследуемых системах действительно имеет место сильное кулоновское взаимодействие (U~10 эВ) электронов на одном узле.

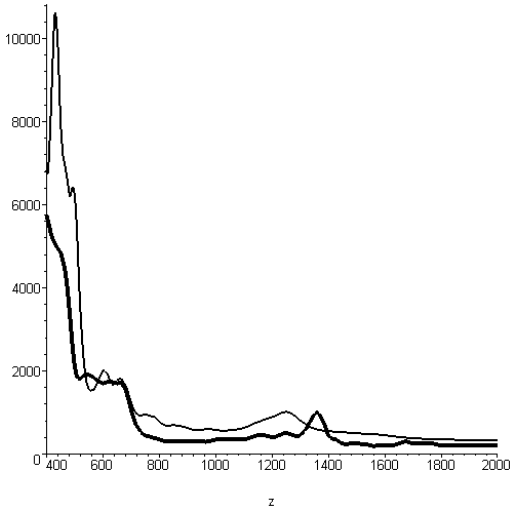


Рисунок 2– Спектр оптического поглощения металлофулерена $Ca@C_{72}$. Тонкая линия – спектр, полученный нами, «жирная» – экспериментальные данные [20]

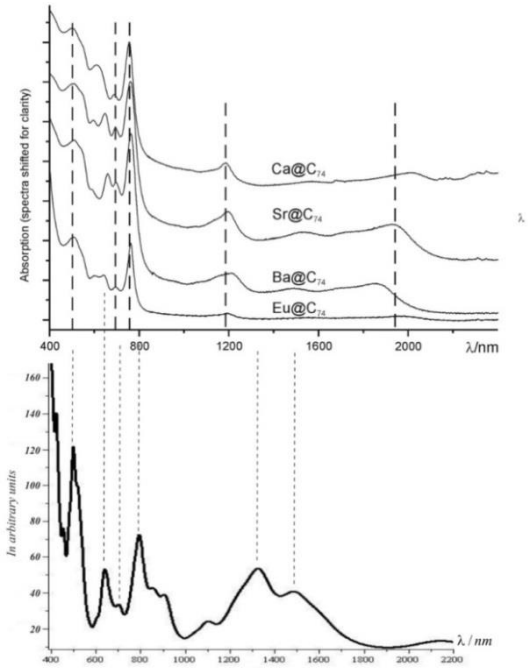


Рисунок 3 – Спектры оптического поглощения: экспериментальные данные для металлофуллеренов $Ca@C_{74}$, $Sr@C_{74}$, $Ba@C_{74}$и $Eu@C_{74}$ [21] и расчет при N_e=-2

Третья глава «Изучение кластеров углеродных нанотрубок в рамках модели Хаббарда» посвящена изучению энергетического спектра кластеров УНТ хиральности (5,5) и анализу изменения их основных электронно-энергетических характеристик с ростом числа атомов в кластере. В этой главе вычислены энергетические спектры, Фурье-образы корреляционных функций $\left\langle a^{+}_{i,\sigma} a_{j,\sigma} \right\rangle_E$ (здесь i и j– соседние узлы) и средние энергии на один атом УНТ хиральности (5,5), содержащих 30, 50, 70, 90 и 190 атомов в кластере. На основе полученных зависимостей сделан вывод о том, что энергетический спектр УНТ претерпевает существенную перестройку из-за сильного кулоновского взаимодействия π-электронов на одном узле. Как и в случае фуллеренов, эта перестройка заключается в том, что энергетический спектр УНТ хиральности (5,5), согласно [5], задаваемый выражением:

$$E_{2D}(k_x,k_y)=\pm B\sqrt{1+4\cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right)\cos\left(\frac{k_y a}{2}\right)+4\cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right)}$$

с граничными условиями: $5\sqrt{3}ak_{x,q}=q2\pi\ q=0,..,5$,где a – параметр решетки, k_x,k_y - волновые вектора, разбивается на две хаббардовские подзоны, как это показано на рисунке 4.

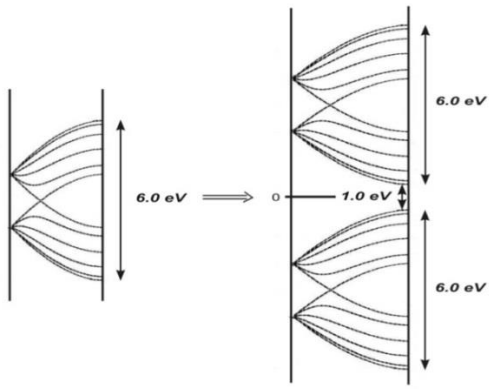


Рисунок 4 – Трансформация энергетического спектра, полученного в [4] при учете хаббардовских корреляций

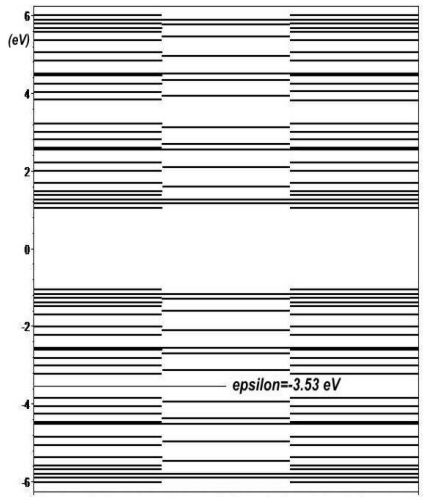


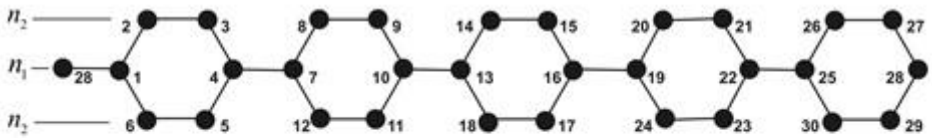
Рисунок 5–Энергетический спектр кластера УНТ хиральности (5,5), состоящего из 30 атомов, при разных значениях ***Ne***=29,30,31

Нижняя хаббардовская подзона соответствует случаю однократного занятия узлов электронами, верхняя – двукратному. В результате, в энергетическом спектре исследуемых систем возникает щель $\Delta=U-6B$, здесь $6B=W$,B – интеграл перескока электронов с узла на узел, W– ширина хаббардовской подзоны. Таким образом, если учесть кулоновское взаимодействие электронов на одном узле, «правило кратности трем», согласно которому УНТ хиральности (5,5) есть проводник с щелью $\Delta=0$, не выполняется. Это согласуется также результатами работы [23], в которой измерялась плотность электронных состояний одиночных УНТ хиральностей (9,0), (12,0) и (15,0), и которые, согласно «правилу кратности трем»,должны быть проводниками. Результаты этой работы

свидетельствуют о том, что в энергетическом спектре указанных УНТ наблюдается щель ~ 0.01 эВ.

В этой главе кластер УНТ хиральности (5,5), состоящий из 30 атомов, был изучен более подробно. Его энергетический спектр был вычислен для случая, когда число электронов не было равно числу узлов. Результат расчета приведен на рисунке 5.

Видно, что в случае, когда число электронов отличается от числа узлов, ширина хаббардовских подзон несколько больше, чем в случае, когда число электронов равно числу узлов. Наиболее существенно отличие этих двух случаев



	Ne=28	Ne=29	Ne=30	Ne=31	Ne=32
n_1	0,886	0,926	1,0	1,074	1,114
n_2	0,957	0,987	1,0	1,013	1,043
$\langle n \rangle$	0,933	0,967	1,0	1,033	1,067
ε	-2,02 eV	-2,22 eV	-3,53 eV	-4,84 eV	-5,04 eV

Рисунок 6– Развертка кластера УНТ хиральности (5,5), состоящего из 30 атомов. Внизу в таблице показано распределение электронов по слоям и значения ε при разном числе электроном в системе, $\boldsymbol{N_e}$=28,29,30,31,32

сказывается на средних значениях чисел заполнения электронами неэквивалентных по симметрии узлов. На рисунке 6 приведена развертка кластера УНТ, состоящего из 30 атомов. Видно, что в системе имеются две группы неэквивалентных узлов: {1,4,7,10,13,16,19,22,25,28} и {2,3,8,9,14,15, 20,21,26,27,5,6,11,12,17,18,23,24,29,30}. Очевидно, что среднее число электронов на узлах первой группы $\langle n_{1\sigma} \rangle = n_1$ должно отличаться от среднего числа электронов на узлах второй группы $\langle n_{2\sigma} \rangle = n_2$. Однако, расчет показывает, что в случае, когда число электронов равно числу узлов N_e=30, среднее значение электронов на разных типах узлов одинаково, и $n_2 = n_1 = 1$. Неэквивалентные узлы по степени заполнения их электронами начинают отличаться друг от друга лишь при N_e , отличном от 30, при N_e=28, 29, 31 и 32. Это обстоятельство связано с тем фактом,

что электронная подсистема находится как бы в «замороженном состоянии», если число электронов равно числу узлов, так как из-за сильного кулоновского взаимодействия электронам энергетически не выгодно перескакивать с узла на узел.

Появление избыточных электронов или узлов, где нет электронов, «дырок», что имеет место в случае, когда $N_e \neq 30$, снимает это «замороженное состояние». Это демонстрируется зависимостью корреляционной функции $\left\langle a^{+}_{1,\sigma} a_{28,\sigma} \right\rangle_E$ от U, представленной на рисунке 7. Анализ зависимости основных электронно-энергетических характеристик системы от числа атомов в кластере, таких, как ширина хаббардовской подзоны W, щель в спектре Δ, и величина U_c, при которой корреляционная функция равна нулю, показывает, что с ростом в кластере числа атомов все эти характеристики стремятся к постоянным значениям: W~6 эВ, Δ~1 эВ, U_c~6 эВ. Значение средней энергии на атом при росте числа атомов в кластере имеет максимум при числе атомов N~60-70, как это показано на рисунке 8. Наличие этого максимума позволяет сделать вывод о том, что УНТ хиральности (5,5) растут, поглощая энергию, и лишь после того, как число атомов достигнет шестидесяти, рост трубок становится энергетически выгодным. Очевидно, что если прекратить подвод тепла, кластеры УНТ из 60-70 атомов прекратят рост и превратятся в фуллерены. То же самое будет наблюдаться, если процесс подвода тепла окажется нестационарным. Это согласуется с результатами работы [10], в которой синтез УНТ проводился методом химического осаждения паров.

Наблюдения с помощью сканирующего электронного микроскопа показали, что достаточно длинные УНТ растут до тех пор, пока не встретят препятствие, или до тех пор, пока процесс их роста поддерживается подачей метана. Интересно, что число атомов в самом устойчивом фуллерене составляет 60, то есть в интервале 60-100 атомов идет конкуренция между образованием фуллеренов (свертывание растущих УНТ в замкнутые структуры) и ростом трубок. После преодоления этого интервала рост трубок становится устойчивым.

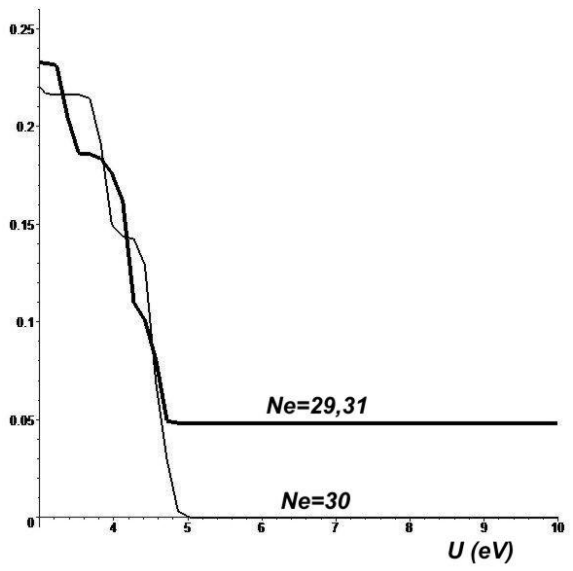


Рисунок 7– Зависимость корреляционной функции $\left\langle a^{+}_{1,\sigma} a_{28,\sigma} \right\rangle_{E}$ от значения $\boldsymbol{U}$в кластере УНТ хиральности (5,5), состоящего из 30 атомов, при разных значениях $\boldsymbol{N_e}$=29,30,31. Жирной линией обозначены графики корреляционной функции, при $\boldsymbol{N_e}$=29 и 31 они совпадают

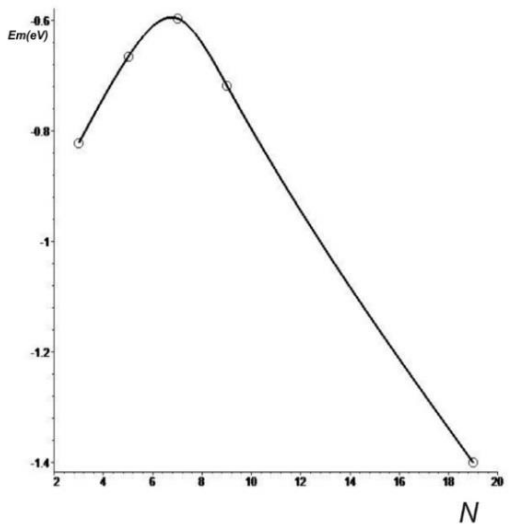


Рисунок 8– Зависимость средней энергии E_m, приходящейся на один атом от числа колец в кластере УНТ

Основные результаты и выводы

1. В приближении статических флуктуаций для модели Хаббарда разработан метод расчета энергетического спектра и спектров оптического поглощения фуллеренов C_{72} и C_{74} и кластеров углеродной нанотрубки хиральности (5,5), с учетом сильного кулоновского взаимодействия π-электронов на одном узле. Получены новые физические представления о влиянии сильного кулоновского взаимодействия на механизм и характер перестройки электронной структуры фуллеренов C_{72} и C_{74}, а также кластеров углеродной нанотрубки хиральности (5,5), состоящих из 30, 50, 70, 90 и 190 атомов, и, как следствие, на формирование оптических свойств исследуемых систем. Показано, что электронный спектр фуллеренов и нанотрубок благодаря сильному кулоновскому

взаимодействию разделяется на две хаббардовские подзоны с образованием щели, которая может достигать значений ~ 1 эВ.

2. На основе вычисленных энергетических спектров фуллеренов C_{72} и C_{74} получены спектры оптического поглощения эндоэдральных металлофуллернов $Ca@C_{72}$ и $M@C_{72}$, где M=Eu, Sc, Sc, Ca, $Yb@C_{74}$ и Ba, которые хорошо согласуются с экспериментально наблюдаемыми спектрами оптического поглощения в исследуемых системах, что позволяет утверждать, что в исследуемых наносистемах имеет место сильное кулоновское взаимодействие (U~10 эВ) электронов на одном узле.

3. Получены функции распределения π-электронов по узлам кластеров углеродной нанотрубки и показано, что в отсутствии в системе допирования π-электроны распределены по узлам равномерно, в противном случае это распределение по узлам неравномерно и существенно немонотонно;

4. Проведен анализ зависимости основных характеристик энергетического спектра, таких как щель между нижней и верхней хаббардовскими подзонами и ширина хаббардовской подзоны, от количества атомов в кластере, который позволяет утверждать, что УНТ хиральности (5,5) в противоречие с «правилом кратности трем» является полупроводником с щелью ~ 1 эВ;

5. Вычислена средняя энергия, приходящаяся на атом, для кластеров углеродной нанотрубки хиральности (5,5), состоящих из 30, 50, 70, 90 и 190 атомов. Полученная зависимость этой энергии от числа атомов в кластере имеет максимум при числе атомов ~ 60– 70, что позволяет сделать вывод о том, что рост УНТ при синтезе идет как конкуренция между процессами дальнейшего роста УНТ и свертывания растущих кластеров в фуллерены с числом атомов, равным 60– 70.

Литература

1. Смолли Р.Е. Открывая фуллерены / Р.Е. Смолли // Успехи физических наук. – 1996. – Т.168, №3. – С. 323– 330.

2. Ebbesen T.W. Patterns in the bulk growth of carbon nanotubes / T.W. Ebbesen, H. Hiura, J. Fujita, Y. Ochiai, S. Matsui, K. Tanigaki //Chemical Physics Letters. – 1993. – Vol. 209. – P.83–90.

3. Мак А. А. Преобразование солнечной энергии в лазерное излучение с использованием фуллерен–кислород–йодного лазера с солнечной накачкой /А.А. Мак, И.М. Белоусова, В.М Киселев В, А.С. Гренишин, О.Б. Данилов, Е.Н. Соснов // Оптический журнал. – 2009.– Т. 76, № 4. –С. 4–24.

4. Бочвар Д.А. О гипотетических системах: карбододекаэдре, s-икосаэдре и карбо-s-икозаэдре /Д.А. Бочвар, Е.Г. Гальперн// Доклады АН СССР. – 1973. – Т.209, № 3. – С. 610–612.

5. Dresselhaus M. S. Carbon fibers based on C_{60} and their symmetry / M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, R. Saito // Physical Review B. – 1992. – Vol. 45. – P. 6234– 6242.

6. Елецкий А.В. Эндоэдральные структуры/ А.В. Елецкий // Успехи физических наук. –2000. –Т.170, №2. –С.113–141.

7. Елецкий А.В. Транспортные свойства углеродных нанотрубок /А.В. Елецкий //Успехи физических наук. –2009.–Т.179, № 3. – С.225–242.

8. Левин А.А. Введение в квантовую химию твердого тела / А.А. Левин. – М.: Химия, 1974. – 238 с.

9. Wehling T.O. Strength of effective Coulomb interactions in graphene and graphite / T.O. Wehling, E. Sasioglu, C. Friedrich, A.I. Lichtenstein, M.I. Katsnelson, S. Blugel // Physical Review Letters. – 2011. – Vol. 106. – P. 236805.

10. Изюмов Ю.А. Материалы с сильными электронными корреляциями / Ю.А. Изюмов, Э.З. Курмаев // Успехи физических наук. – 2008. – Т. 178, № 1. – С. 25– 60.

11. Hubbard J. Electron Correlations in Narrow Energy Bands / J. Hubbard // Proceedings of the Royal Society. – 1963. – Vol. 276. – P. 238-257.

12. Li S. Electrical properties of 0.4 cm long single walled carbon nanotubes / S. Li, Z. Yu, S-F. Yen, W.C. Tang, P.J. Burke // Nano Letters. –2004. –Vol.4. – P. 2003–2007.

13. Лоскутов В.В. Приближение статических флуктуаций для модели Хаббарда /В.В. Лоскутов, Г.И. Миронов, Р.Р. Нигматуллин // Физика низких температур. – 1996. – Т. 22, № 3. – С. 282– 286.

14. Миронов Г.И. Решение B-U-V модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций/Г.И. Миронов// Сборник статей "Актуальные проблемы физики конденсированных сред" Казань, 2004. – С. 235– 257.

15. Nigmatullin R.R. Thermodynamics of an interacting Fermi System in the static fluctuation Approximation/ R.R. Nigmatullin, A.A. Khamzin, I.I. Popov // JETP. – 2012.– V. 142, N 2. –P. 355– 365.

16. Изюмов Ю.А. Модель Хаббарда в режиме сильных корреляций / Ю.А. Изюмов// Успехи физической науки. – 1995. – Т. 165, № 4. – С. 403–427.

17. Liu X. Favorable structures for higher fullerenes / X. Liu, T.G. Schmalz, D.J. Klein. //Chemical Physics Letters. – 1992. – Vol. 188. – P. 550– 554.

18. Michael D. Diener. Isolation and properties of small– bandgap fullerenes /Michael D. Diener, John M. Alford. // Nature. – 1998. – Vol. 393. – P. 668 – 671.

19. Николаев А.В. Фуллерен C_{60} как псевдоатом икосаэдрической симметрии / А.В. Николаев, Б. Н. Платухин// Успехи химии. – 2010. – Т. 79. – № 9. С. 803 – 831.

20. Kamat P. V. Fullerenes: Recent Advances in the Chemistry and Physics of Fullerenes and Related Materials /P.V. Kamat, K. M. Kadish, D. M Guldi // The Electrochemical Society: Pennington. - USA. – 1999. – V. 7. – P.832.

21. Hisanori Shinohara. Isolation and spectroscopic properties of SC_2-AT-C_{74},SC_2-AT-C_{82}, and SC_2-AT-C_{84} / Hisanori Shinohara, Hiroki Yamaguchi, Naoyuki Hayashi, Hiroyasu Sato, Masato Ohkohchi, Yoshinori Ando, Yahachi Saito // Journal of Chemical Physics. –1993.– Vol.97. – N.17.– P. 4259– 4261

22. Сидоров Л.Н. Фуллерены / Л.Н. Сидоров, М.А. Юровская, А.Я. Борщевский, И.В. Трушков, И.Н. Иоффе. – М.: Экзамен, 2005. – 668 с.

23. Ouyang M. Atomically resolved single-walled carbon nanotube intramolecular junctions / M. Ouyang, J.L. Huang, C.L. Cheung, C.M. Lieber // Science. – 2001. – Vol. 291. – N. 5501.– P. 97– 100.

Работы автора по теме диссертации

Статьи 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, в том числе в изданиях, индексируемых Web of Science:

1. **Арутюнова (Назарова) Т. Э.** Энергетический спектр и корреляционные функции кластеров углеродных нанотрубок хиральности (5,5) / Т. Э. Арутюнова (Назарова), Г. И. Миронов, А. И. Мурзашев // Физика твердого тела. – 2012. – Т. 54, вып. 9. – С. 1797–1807. – 0,42 / 0,2 п.л.

в переводной версии журнала:

Arutyunova (Nazarova) T. E. Energy spectrum and correlation functions of clusters of carbon nanotubes with the (5, 5) chirality / T. E. Arutyunova (Nazarova), G. I. Mironov, A. I. Murzashev // Physics of the Solid State. – 2012. – Vol. 54, is. 9. – P. 1917–1929. – DOI: 10.1134/S106378341209003X

2. Мурзашев А. И. Энергетический спектр и спектр оптического поглощения эндоэдрального фуллерена Ca@C_{72} / А. И. Мурзашев, **Т. Э. Назарова** // Физика металлов и металловедение. – 2014. – Т. 115, № 7. – С. 675–681. – 0,38 / 0,2 п.л.

в переводной версии журнала:

Murzashev A. I. Energy spectrum and spectrum of optical absorption of endohedral fullerene Ca@C72 / A. I. Murzashev, **T. E. Nazarova** // The Physics of Metals and Metallography. – 2014. – Vol. 115, is. 7. – P. 635–641. – DOI: 10.1134/S0031918X14040103

3. Мурзашев А. И. Энергетический спектр и оптические свойства фуллерена C_{74} в рамках модели Хаббарда / А. И. Мурзашев, **Т. Э. Назарова** // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2014. – Т. 146, № 5. – С. 1026–1034. – 0,64 / 0,3 п.л.

в переводной версии журнала:

Murzashev A. I. Energy spectrum and optical properties of C_{74} fullerene with in the Hubbard model / A. I. Murzashev, T. I. Nazarova // Journal of Experimental and Theoretical Physics. – 2014. – Vol. 146, is. 5. – P. 902–909. – DOI : 10.1134/S106377611411017X

4. Melnikova N. V. Theoretical investigation of energy spectrum of carbon nanotubes in the frame of strong related state conception / N. V. Melnikova, A. I. Murzashev, **T. E. Nazarova**, E. O. Shadrin // Synthetic Metals. – 2016. – Vol. 220. – P. 292–299. – DOI : 10.1016/j.synthmet.2016.06.024. – 0,89 / 0,3 п.л.

Публикации в других научных изданиях:

5. **Арутюнова (Назарова) Т. Э.** Углеродные нанотрубки в модели Хаббарда / Т. Э. Арутюнова (Назарова), Г. И. Миронов, А. И. Мурзашев // IV Всероссийская конференция по наноматериалам : сборник материалов. Москва, 01–04 марта 2011 г. – М., 2011. – С. 181. – 0,07 / 0,04 п.л.

6. **Арутюнова (Назарова) Т. Э.** Энергетический спектр и корреляционные функции кластеров углеродных нанотрубок хиральностью (5,5) в модели Хаббарда / Т. Э. Арутюнова (Назарова), Г. И. Миронов, А. И. Мурзашев // Структура и динамика молекулярных систем : сборник тезисов XVIII всероссийской конференции. Казань, 04–09 июля 2011 г. – Казань, 2011. – С. 8. – 0,04 / 0,02 п.л.

7. **Арутюнова (Назарова) Т. Э.** Углеродные нанотрубки в модели Хаббарда на примере системы из 30 атомов / Т. Э. Арутюнова (Назарова), Г. И. Миронов, А. И. Мурзашев // Физика и ее преподавание в школе и вузе. X Емельяновские чтения : материалы региональной научно-практической конференции. Йошкар-Ола, 23–24 апреля 2012 г. – Йошкар-Ола, 2012. – С. 11–13. – 0,18 / 0,12 п.л.

8. **Арутюнова (Назарова) Т. Э.** Энергетический спектр и корреляционные функции кластеров углеродных нанотрубок хиральностью (5,5) / Т. Э. Арутюнова (Назарова) // Актуальные решения современной науки : сборник научных работ аспирантов. – Йошкар-Ола, 2011. – Вып. 2. – С. 167–172. – 0,38 / 0,3 п.л.

9. **Назарова Т. Э.** Кластер углеродной нанотрубки из 40 атомов в модели Хаббарда/ Т. Э. Назарова // Актуальные решения современной науки : сборник научных работ аспирантов. Йошкар-Ола, 2012. – Вып. 3. – С. 187–190. – 0,5 / 0,38 п.л.

10. **Арутюнова (Назарова) Т. Э.** Энергетический спектр и корреляционные функции фуллерена C_{60} и кластеров углеродных нанотрубок хиральности (5,5) / Т. Э. Арутюнова (Назарова), Г. И. Миронов, А. И. Мурзашев // Шестая международная научная школа «Наука и инновация – 2011» : материалы Шестого международного научного семинара «Фундаментальные исследования и инновации» и всероссийского молодежного научного семинара «Наука и инновация – 2011». Йошкар-Ола, 18–24 июля 2011 г. – Йошкар-Ола, 2011. – С. 37–51. – 0,5 / 0,14 п.л.

11. Мурзашев А. И. Энергетический спектр и спектр оптического поглощения эндоэдрального фуллерена Ca@ C_{72} / А. И. Мурзашев, **Т. Э. Назарова** // XLVII Школа ФГБУ «ПИЯФ» по физике конденсированного состояния (ФКС – 2013) : сборник тезисов. Санкт–Петербург, 11–16 марта 2013 г. – Гатчина, 2013. – С. 82. – 0,04 / 0,02 п.л.

Издание подготовлено в авторской редакции.

Отпечатано на оборудовании
типографии рекламно-производственной компании "Милон"
634050, г. Томск, пр.Фрунзе, 7, тел. (3822) 52-81-95.
E-mail: welcome@mylon.tomsk.ru
Заказ 1163 от «26» мая 2017 г. Тираж 100 экз.