

ОТЗЫВ

На автореферат диссертации Петрова Бориса Владимировича «**Оптические свойства низкоразмерных органических проводников на основе молекул EDT и BEDT**», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 - физика конденсированного состояния

Актуальность работы Молекулярные проводники на основе катион-радикальных солей обладают многими полезными свойствами (проводящие, магнитные, оптические), и эта область исследований привлекает внимание многих учёных. В научных публикациях имеются лишь разрозненные данные об оптических свойствах органических проводников конкретного состава, и практически нет работ, в которых был бы проведен количественный анализ спектров отражения и получены константы энергетической структуры.

Новые результаты о влиянии структуры низкоразмерных органических проводников на энергетические параметры их электронной системы позволят более эффективно подойти к выбору структурных мотивов синтезируемых органических соединений, в том числе проводящих и сверхпроводящих.

Научная новизна В диссертационной работе оптическим способом исследовались три группы органических соединений на основе молекул EDT-TTF и BEDT-TTF с различными проводящими свойствами:

1. Впервые получены поляризованные ИК спектры отражения в области $600-6500\text{ cm}^{-1}$ в широком температурном интервале ($T=10-300\text{ K}$) этих соединений. Из дисперсионных соотношений были рассчитаны другие оптические функции, в частности, оптическая проводимость.

2. Впервые для органических металлов $(\text{EDT-TTF})_4[\text{Hg}_3\text{I}_8]_{0.973}$ и $(\text{EDT-TTF})_4[\text{Hg}_3\text{I}_8]$ был проведен количественный анализ спектров отражения в рамках модели «фазовых фононов». Получена температурная зависимость ширины полупроводниковой щели от температуры.

3. Впервые проведен количественный анализ спектров оптической проводимости соединений группы k - $(\text{BEDT-TTF})_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Br}_x\text{Cl}_{1-x}$ на основе предложенной комбинированной полуэмпирической модели, включающей кластерную (тетрамерную) модель и модель свободных электронов Друде.

4. Впервые определены параметры энергетической структуры кристаллов $(\text{EDT-TTF})_3[\text{Hg}_2\text{Br}_6]$ и $(\text{EDT-TTF})_3\text{Hg}(\text{SCN})_3\text{I}_{0.5}(\text{PhCl})_{0.5}$ в приближении гамильтониана Хаббарда.

Практическая значимость

На примере 3-х групп соединений с отличающейся структурой проводящих слоев и, соответственно, различными электропроводящими свойствами, раскрыта методика, позволяющая на основе оптических данных рассчитывать параметры энергетической структуры. Для этого автором был разработан программный модуль с графическим интерфейсом, увеличивший скорость и точность вычислений. Использование этой программы возможно для большинства низкоразмерных органических проводников, структура которых состоит из стопок молекул.

Достоверность полученных результатов обусловлена хорошей воспроизводимостью экспериментальных данных, выбором объективного теоретического подхода. Полученные результаты согласовывались с данными научных публикаций.

Петров Б.В. является соавтором 13-ти научных работ по теме исследования, в том числе в международных журналах.

По тексту автореферата возникает несколько замечаний:

1. На рисунках 2 и 7 пунктиром указаны короткие S-S контакты, однако на рисунке 11 со структурой k - (BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]V_xCl_{1-x} их нет. Желательно было их нарисовать.
2. Структура проводящего слоя кристаллов (EDT-TTF)₃Hg(SCN)₃I_{0.5}(PhCl)_{0.5} состоит из гексамеров, но для описания спектров применяется кластерный теоретический подход для трех сгруппированных молекул. Как объяснить это допущение?
3. На рисунке 3 стр.10 картинки слева и справа имеют различный стиль и шрифт.

Сделанные замечания не влияют на высокую оценку диссертационной работы Петрова Б.В. «Оптические свойства низкоразмерных органических проводников на основе молекул EDT и BEDT». Следует отметить высокий научный уровень представленной диссертации.

Считаю, что диссертационная работа Петрова Б.В. полностью удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 «Физика конденсированного состояния», согласно Положению о присуждении ученых степеней в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Физико-техническом институте им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук, а ее автор Петров Борис Владимирович заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук.

Доктор химических наук,
профессор кафедры коллоидной химии
Института Химии Санкт-Петербургского
государственного университета

(Носов Борис Анатольевич)

Подпись автора отзыва заверяю:

И.о. начальника
отдела кадров № 3
И.И. Константинова

05.05.2015