

Роман Полозков

«Эффекты многочастичных корреляций в энергетическом спектре и оптическом отклике многокомпонентных наноструктур»

Аннотация: Доклад по материалам моей докторской диссертации, в которой систематизированы результаты теоретической работы по исследованию роли многочастичных корреляций в формировании энергетического спектра и оптического отклика многокомпонентных наноструктур. Реальные системы, с которыми приходится иметь дело на практике – это многочастичные системы, такие как атом, ядро, молекулы, кластеры, кристаллические структуры, плотные газы, плазма и другие, поэтому решение проблемы учета многочастичных корреляций в процессах взаимодействия частиц представляет существенный научный интерес. В настоящей работе используются оба существующих на данный момент пути учета многочастичных корреляций в системах с сильным межчастичным взаимодействием: последовательное применение квантовой теории многих тел, базирующееся на методах квантовой теории поля и, в частности, диаграммной технике Фейнмана, и в применении теории функционала плотности. Оба подхода позволяют учесть как статические, так и динамические корреляции в многочастичной системе.

Наиболее важные результаты диссертации включают: разработку теоретического подхода, позволяющего применить модель желе к расчету электронной структуры и спектров фотоионизации фуллеренов, их ионов и эндофуллеренов с учетом многоэлектронных корреляций, что позволяет воспроизвести появление гигантского плазмонного резонанса в их спектрах фотопоглощения; теоретически доказано, что для воспроизведения экспериментальных данных зависимости параметра угловой анизотропии фотоэлектронов от энергии фотонов для металлических кластеров с симметрией, близкой к сферической, в расчетах необходимо учитывать динамические многоэлектронные корреляции; предложен сценарий возникновения режима сильной связи между плазмонными возбуждениями в металлическом кластере и фотонами резонатора при учете динамических многочастичных корреляций, что приводит к образованию дублета Раби с величиной расщепления на несколько порядков больше, чем у других нульмерных квантовых объектов; предсказан новый вид связанного состояния электрон-позитронной материи - электрон-позитронные кластеры (ЭПК) и теоретически обоснована стабильность такой системы относительно распада на систему дипозитрониев в определенном диапазоне пар частиц; предложен новый метод построения псевдопотенциала фуллерена и его ионов на основе расчетов из первых принципов полной электронной плотности, что позволяет получить псевдопотенциал, который может быть аппроксимирован и представлен в аналитическом виде; теоретически показано, что вблизи края поглощения в спектре фотопоглощения металлоорганического координационного полимера на базе цинка (МОКП-Zn) в монослойной и двухслойной конфигурации могут образовываться только темные экситоны, что доказывается расчетом энергетического спектра с учетом многоэлектронных корреляций; предсказано и в рамках расчетов из первых принципов теоретически обосновано, что горизонтальный массив параллельно расположенных углеродных нанотрубок является гиперболическим материалом.