

на правах рукописи

Коняхин Сергей Васильевич

**Исследование оптических и колебательных свойств
углеродных наноструктур**

Специальность 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург
2016

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном учреждении науки Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе Российской академии наук и федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет Российской академии наук»

Научный руководитель:

Эйдельман Евгений Давидович

Доктор физико-математических наук, профессор

Старший научный сотрудник федерального государственного

бюджетного учреждения науки Физико-технический институт имени

А.Ф. Иоффе Российской академии наук

Официальные оппоненты:

Адамчук Вера Константиновна

Доктор физико-математических наук, профессор

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение

высшего образования «Санкт-Петербургский государственный

университет», главный научный сотрудник

Зеликман Марк Аронович

Доктор физико-математических наук, профессор

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение

высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический

университет Петра Великого»

Ведущая организация:

Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт"

Федеральное государственное бюджетное учреждение Петербургский

институт ядерной физики им. Б.П. Константинова

Защита состоится « » _____ 2016 г. в _____ часов _____ минут на заседании диссертационного совета Д 002.205.01 при ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН по адресу: 194021, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 26.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН и на сайте института <http://www.ioffe.ru>.

Автореферат разослан « » _____ 2016 г.

Ученый секретарь диссертационного совета, к.ф.-м.н.

А.А. Петров

Общая характеристика работы

Можно смело утверждать, что углеродные наноструктуры заняли одно из виднейших мест в современной нанотехнологии [1,2]. Благодаря широкому спектру их свойств они используются в различных отраслях, начиная от машиностроения и электроники и заканчивая нанобиотехнологией [3,4]. Углеродные наноструктуры включают открытые в середине XX века в Советском Союзе [5] детонационные наноалмазы и другие виды нанокристаллических алмазов, графен, графиты, фуллерены, нанотрубки, луковичные структуры.

Многообразие углеродных наноструктур определяется способностью атомов углерода к различному типу гибридизации электронных оболочек: от sp^3 - «алмазной», до sp^2 – «графитовой». При этом фазовый переход между этими алмазоподобными и графитоподобными формами углеродных наноструктур происходит достаточно легко, особенно для нанометровых объемов вещества, поэтому наноалмазы и графитоподобные структуры, включая графен, оказываются тесно связанными.

Однако, несмотря на уже начавшееся широкое применение углеродных наноструктур, остается нерешенным комплекс теоретических вопросов, в том числе связанных с их оптическими и колебательными свойствами. Это обуславливает **актуальность** темы диссертационной работы.

Цель работы состоит в рассмотрении колебательных и оптических свойств углеродных наноструктур и решении следующих задач:

- применимость методов динамического светового рассеяния для определения размеров алмазных наночастиц в гидрозолях,
- применимость метода комбинационного рассеяния света для определения размеров частиц в порошках наноалмазов,
- вклад от эффекта увлечения электронов фононами в термоэлектрические свойства графена,
- расчет матричного элемента электрон-фононного взаимодействия в графене,

- расчет эффекта выпрямления тока и фотогальванического эффекта в графене при рассеянии носителей заряда на потенциале треугольной формы

Научная новизна работы определяется следующим:

Впервые при расчетах спектров оптической плотности гидрозолей детонационных наноалмазов было учтено распределение частиц по размерам. Впервые расчеты проведены с учетом графитоподобной фазы на поверхности наноалмазных частиц.

Впервые произведена проверка соотношения Стокса-Эйнштейна, связывающего коэффициент диффузии частицы в растворителе и ее размер, для алмазных частиц нанометровых размеров при помощи симуляции броуновского движения наночастиц методом полноатомной молекулярной динамики.

Впервые проанализирована модель фононного конфайнмента, широко используемая для характеристики наночастиц по размерам с помощью их спектров комбинационного рассеяния. Изучено влияние на точность определения размеров частиц неопределенности параметров модели фононного конфайнмента и дисперсии фононов, а также эффектов от нагрева кристаллитов и наличия в них механических напряжений. Предложена усовершенствованная модель фононного конфайнмента, учитывающая конечное время пробега фононов по нанокристаллиту.

Впервые показано, что вклад от увлечения электронов фононами в термоэлектродвижущую силу в графене может превышать диффузионный вклад.

Впервые теоретически рассмотрены эффект выпрямления тока и фотогальванический эффект в графене, вызванные асимметричным рассеянием носителей на когерентно ориентированных дефектах, обладающих симметрией равностороннего треугольника.

Практическая значимость работы состоит в установлении точности определения размеров наночастиц методами динамического светового рассеяния и комбинационного рассеяния света в гидрозолях и порошках

детонационных наноалмазов, Предложен простой рецепт маркировки гидрозолей детонационных наноалмазов на основе анализа их спектров поглощения и рассеяния. Показано, что вклад эффекта увлечения электронов фононами в термоэлектродвижущую силу в графене может быть сопоставим с диффузионным вкладом, что важно при разработке новых типов термоэлементов. Произведен расчет фотогальванического эффекта, вызванного асимметричным рассеянием носителей в графене на дефектах, имеющих симметрию равностороннего треугольника, что важно для создания нового типа детекторов терагерцового излучения.

Положения, выносимые на защиту

1. Погрешность в определении распределения по размерам алмазных наночастиц в гидrozолях методом динамического светового рассеяния существенно возрастает при наличии крупных (50 нм и более) агрегатов.
2. Время свободного пробега фонона по нанокристаллиту дает вклад в уширение спектров комбинационного рассеяния порошков наноалмазов.
3. Для частиц размером более 3 нм, точность соотношения Стокса-Эйнштейна, связывающего коэффициент диффузии в жидкости и размер частиц, оказывается достаточной для применения метода динамического светового рассеяния.
4. В интервале температур от температуры жидкого азота до комнатной в графене с высокой концентрацией носителей и высокой теплопроводностью вклад в термоэлектродвижущую силу от увлечения электронов фононами сравним с диффузионным вкладом.
5. Асимметричное рассеяние носителей на дефектах, обладающих симметрией равностороннего треугольника, вызывает в графене эффект выпрямления тока и фотогальванический эффект.

Апробация работы. Результаты, полученные диссертационной работе, многократно докладывались на семинарах в Физико-техническом институте

имени А.Ф. Иоффе, а также на международных, всероссийских и молодежных конференциях, в том числе «Nanostructures: Physics and Technology» (Санкт-Петербург, 23-25 июня 2014 г.), четвертой Всероссийской школе-конференции для молодых ученых «Макромолекулярные нанобъекты и полимерные нанокompозиты» (Москва, 21-26 октября 2012 г.), 12-й всероссийской молодёжной конференции по физике полупроводников и наноструктур, оптики и наноэлектронике (Санкт-Петербург, 25-29 октября 2010 г.), 53-й научной конференции МФТИ «Современные проблемы прикладных и фундаментальных наук» (Москва, 24-29 ноября 2010 г.), V всероссийской студенческой школе-семинаре по физике, нано-, био- и информационным технологиям (Санкт-Петербург, 15 мая 2012 г.), Конференции (школе-семинаре) для молодых ученых Санкт-Петербурга и Северо-Запада «Физика и астрономия» (Санкт-Петербург, 29-30 октября 2009 г.), Международной зимней школе по физике полупроводников (Зеленогорск, 25 февраля - 1 марта 2010 г. и 28 февраля - 3 марта 2014 г.), международных конференциях The 4th International Workshop on Advanced Spectroscopy and Optical Materials (IWASOM'13, 14-19 июля 2013 г. Гданьск, Польша), New Diamond and Nano Carbons в 2010 году (15-19 мая 2010 г., Сучжоу, Китай) и 2007 году (NDNC2007, 28-31 мая 2007 г., Осака, Япония), 9th International Conference on Electromagnetic and Light Scattering by Non-Spherical Particles (ELS9, июнь 2006 г., Санкт-Петербург). В 2011, 2013 и 2015 годах результаты докладывались на международной конференции Advanced Carbon Nanostructures (ACNS2011, ACNS2013, ACNS2015).

Публикации. Содержание диссертации полностью отражено в 8 статьях (без учета материалов конференций), опубликованных в рецензируемых научных изданиях, в том числе рекомендованных ВАК РФ и входящих в базы данных Web of Science и Scopus. Список публикаций приведен в конце автореферата.

Личный вклад автора. Диссертация является самостоятельной и законченной научно-исследовательской работой. Все теоретические расчеты спектров статического и комбинационного рассеяния в гидрозолях и

порошках детонационных наноалмазов, а также расчеты транспортных свойств графена, приведенные в 1, 2 и 4 главах были получены диссертантом лично. В 3 главе диссертантом были проинтерпретированы данные симуляции броуновского движения наноалмазов, полученные методом молекулярной динамики м.н.с. Лаборатории нанобиотехнологий СПб АУ РАН И.Е. Елисеевым.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из вводной части, четырех глав, заключительной части и списка литературы. Диссертация содержит 167 печатных страниц, 62 рисунка, 5 таблиц, в списке литературы даны ссылки на 189 источников, включающих статьи в зарубежных и отечественных журналах, монографии и тома из курса теоретической физики Ландау и Лифшица.

Содержание работы

Во **введении** показана актуальность и научная новизна данной работы, перечислены основные положения, выносимые на защиту, конспективно изложено содержание глав диссертации и дан список основных опубликованных работ по теме диссертации. Каждая из глав диссертации, содержит соответствующий вводный раздел, включающий обзор литературы по тематике главы. В конце глав подведены промежуточные итоги и обсуждаются полученные результаты.

Первая глава диссертации посвящена теоретической интерпретации данных о спектрах оптической плотности у гидрозолей детонационных наноалмазов, задаваемой формулой

$$y = \ln \frac{I_{In}}{I_{Out}} = \alpha_{ext} \cdot l, \quad (1)$$

где I_{In} и I_{Out} – интенсивности исходящего и попавшего на детектор излучения, а l – пройденный светом путь. Коэффициент затухания α_{ext} определяется сечениями экстинкции σ_{ext} и концентрациями n имеющихся в гидрозоле частиц различных размеров

$$\alpha_{ext} = \sum_i \sigma_{ext}^{(i)} \cdot n^{(i)}. \quad (2)$$

В главе вычисляются сечения поглощения и рассеяния (дающие в сумме сечение экстинкции) алмазных наночастиц и их агрегатов, поглощение – в дипольном приближении, а для рассеяния производится сопоставление данных, полученных в дипольном приближении (Рэлеевское рассеяние) [7] и в рамках теории Ми [6]. Делается предположение о наличии в составе алмазных кристаллитов графитоподобной фазы, позволяющее объяснить спектр оптической плотности в гидрозоле в диапазоне длин волн от 600 до 800 нм, где важный вклад вносит поглощение.

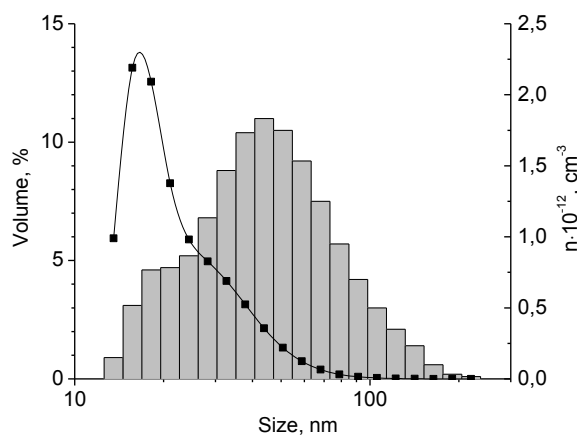


Рис. 1. Распределение по размерам алмазных частиц в гидрозоле, полученное методом динамического светового рассеяния. Гистограмма показывает объемную долю частиц различных размеров (левая ось). Кривая – пересчет гистограммы в концентрации частиц различных размеров (правая ось).

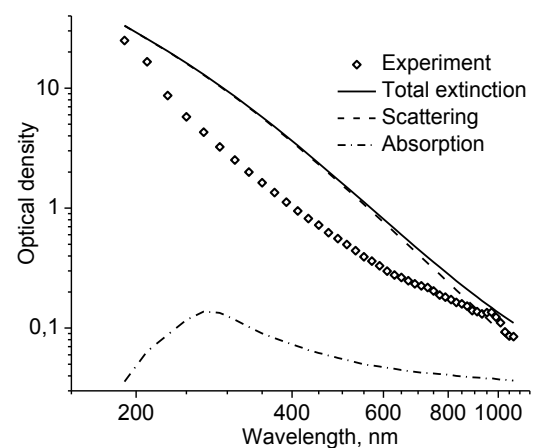


Рис. 2. Экспериментальный (ромбы) и расчетный, построенный с использованием полного распределения частиц по размерам (сплошная линия), спектры оптической плотности гидрозоля. Также представлены расчетные общее рассеяние в гидрозоле (пунктир) и общее поглощение (штрихпунктир).

Спектры оптической плотности строятся на основе полученных методом динамического светового рассеяния распределений частиц в гидрозолях по размерам. Показывается, что имеющиеся согласно данным динамического светового рассеяния крупные (более 100 нм) агрегаты в теории рассеяния Ми

давали бы отклонения интенсивности рассеяния (плавный переход к сечению, соответствующему геометрической площади тени) от характерной для Рэлеевского рассеяния пропорциональности длине волны рассеиваемого света в четвертой степени. На практике такого отклонения не наблюдается, откуда делается вывод о том, что метод динамического светового рассеяния завышает долю крупных частиц (см. рис. 1-4).

В конце главы описывается простой и естественный рецепт для маркировки гидрозолей детонационных наноалмазов на основе согласования спектров поглощения и рассеяния, рассчитанных в рамках бимодальной модели распределения по размерам детонационных наноалмазов и их агрегатов, с экспериментальными данными.

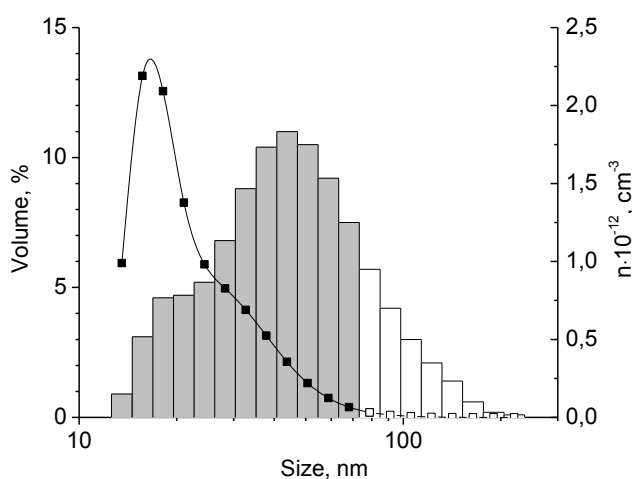


Рис. 3. Распределение частиц в гидрозоле по размерам. Гистограмма – объемные доли, соответствует левой оси. Белый цвет имеют выводимые из рассмотрения столбцы. Кривая – пересчет гистограммы в концентрацию, соответствует правой оси.

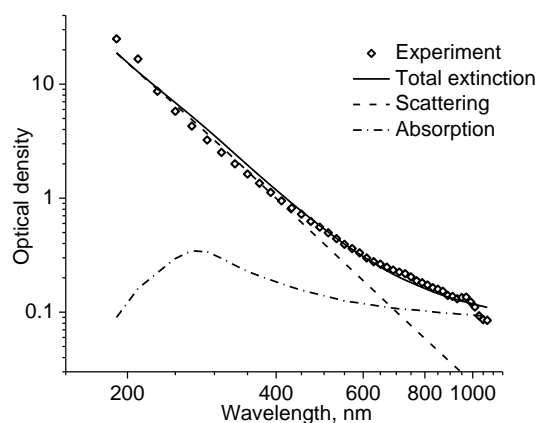


Рис. 4. Экспериментальный (ромбы) и расчетный построенный с использованием распределения частиц по размерам с выведением из рассмотрения крупных частиц (сплошная линия) спектры оптической плотности гидрозоль. Также представлены общее рассеяние в гидрозоле (пунктир) и общее поглощение (штрихпунктир).

Во второй главе диссертации производится теоретическое исследование спектров комбинационного (рамановского) рассеяния света в порошках наноалмазов. Производится расчет спектров комбинационного рассеяния света порошков наноалмазов в модели фононного конфайнмента, заключающейся в учете релаксации закона сохранения импульса при локальном взаимодействии света и фононной системы ограниченного в пространстве кристаллита размером L . Форма линии спектра КРС в модели фононного конфайнмента дается следующим выражением [8,9]:

$$I(L, \omega) \sim \int_0^1 \exp\left(-\frac{(qL)^2}{2\alpha}\right) \frac{q^2 dq}{(\omega - \omega_{ph}(q))^2 + \Gamma^2 / 4}, \quad (3)$$

где α – эмпирический параметр модели фононного конфайнмента, $\omega_{ph}(q)$ – частота фононов с соответствующим волновым вектором, а Γ – параметр уширения, являющийся комбинацией собственного уширения рамановской линии в алмазе Γ_0 , которая для нулевой температуры имеет величину 1.1 см^{-1} и времен, соответствующих другим механизмам. Данная модель позволяет качественно объяснить смещение и асимметричное уширение пика монокристаллического алмаза на 1332.5 см^{-1} в спектре. Изучается влияние неопределенности параметров модели фононного конфайнмента на точность определения размеров частиц с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния. Показывается к каким изменениям в спектре комбинационного рассеяния приводят такие эффекты, как нагрев кристаллитов в исследуемом порошке возбуждающим излучением, наличие в кристаллитах механических напряжений.

Для сравнения с расчетами в модели фононного конфайнмента производится обработка полученных экспериментально спектров комбинационного рассеяния различных порошков наноалмазов для выделения пика на 1332.5 см^{-1} . Делается вывод о том, что модель фононного конфайнмента описывает полученные спектры лишь качественно и спектроскопия комбинационного рассеяния не может служить точным

независимым методом определения размеров кристаллитов. Эффекты же от нагрева образцов (см. рис. 5) и наличия в них механических напряжения оказывают на спектр совместное влияние, и выделить их вклады по отдельности не представляется возможным.

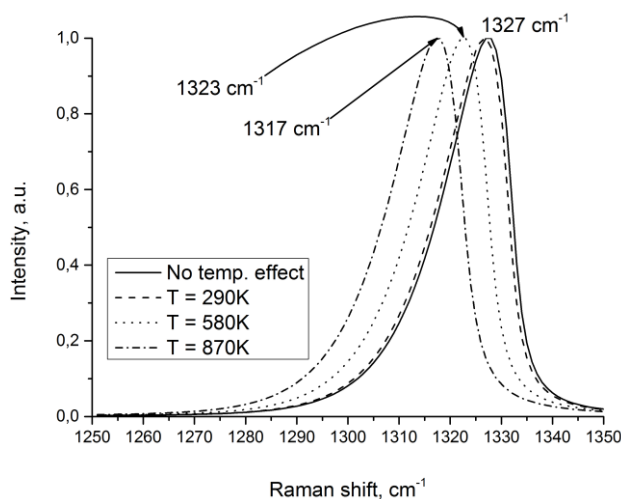


Рис. 5. Расчет влияния температуры на форму и положение пика спектра КРС порошка наноалмазов. Температура дана в Кельвинах. Расчеты в модели фононного конфайнмента для кристаллитов размером $L = 4$ нм. Уширение $\Gamma = 4$ cm^{-1} . Параметр модели конфайнмента $\alpha = 9.67$. Сплошная линия показывает спектр рассчитанный без учета температурных сдвига и уширения. Штриховой линией изображен спектр при температуре 290 К, точечной – 580 К, штрихпунктирной – для 870 К.

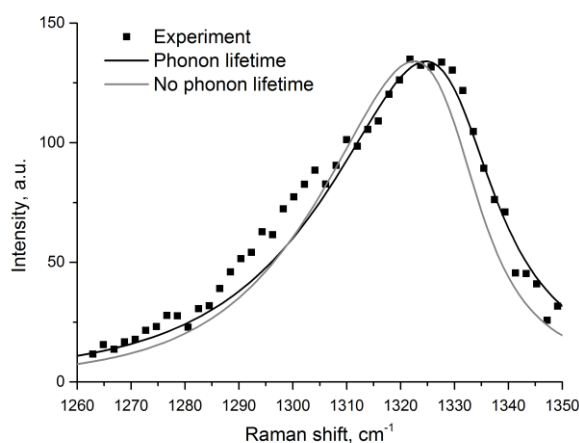


Рис. 6. Сопоставление результатов расчетов спектров комбинационного рассеяния в модели фононного конфайнмента с учетом времени жизни фононов (черная линия), без учета (серая линия) и эксперимента, образец агрегатов детонационных наноалмазов. Параметр размерного уширения: $C = 4$. Расчеты для кристаллитов размером $L = 4$ нм. Аппаратное уширение $\Gamma_D = 16$ cm^{-1} . Параметр модели конфайнмента $\alpha = 9.67$.

Предлагается усовершенствование модели фононного конфайнмента, заключающееся в учете конечного времени пробега по нанокристаллиту, позволяющее улучшить качество воспроизведения экспериментальных спектров при расчетах. В нанокристаллитах, согласно модели конфайнмента, проявляются фононы не только из центра зоны Бриллюэна, но из некоторой ее

окрестности, оцениваемой как $1/L$. Такие фононы обладают отличной от нуля групповой скоростью $v(q)=\partial\omega(q)/\partial q$ и, соответственно, отличным от нуля временем свободного пробега по нанокристаллиту:

$$\tau(q) = C \cdot L \cdot \left(\frac{\partial\omega}{\partial q} \right)^{-1}, \quad (4)$$

где C – параметр размерного уширения, что дает поправку к параметру уширения Γ , см. рис. 6.

В третьей главе диссертации производится исследование особенностей диффузии углеродных частиц размером от 1 до 5 нм в воде. Устанавливается, приводят ли нарушение броуновского предела (диффундирующая частица значительно тяжелее и больше по размерам, чем молекула растворителя) и проявляющаяся на таком масштабе атомарная структура вещества к нарушению соотношения Стокса-Эйнштейна, связывающего размер и коэффициент диффузии частицы. Производится симуляция методом полноатомной молекулярной динамики в пакете GROMACS [10] броуновского движения углеродных наночастиц в боксе, заполненном водой.

Применяются методы вычисления коэффициента диффузии частицы по рассчитанной траектории движения частицы, основанные на анализе среднего квадрата смещения и анализе автокорреляционной функции скорости с помощью соотношений Кубо. Из рис. 7. видно, что расчетный коэффициент диффузии имеет зависимость от размера бокса, в котором проводится симуляция, и данный размерный эффект хорошо совпадает с выдвинутыми ранее теоретическими предсказаниями [11].

Полученные данные позволяют также сделать вывод о переходе от гидродинамических граничных условий прилипания для крупных частиц (более 3 нм) к граничным условиям скольжения, а также о важности учёта размера молекул воды, дающего вклад в гидродинамический радиус частицы для меньших частиц.

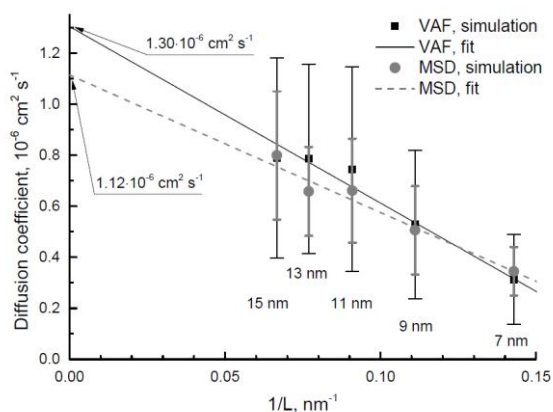


Рис. 7. Зависимость коэффициента диффузии 4 нм частицы от размера бокса, в котором производится симуляция. Черные квадраты показывают результаты симуляции, полученные с помощью анализа по формуле Кубо автокорреляционной функции скорости. Черная прямая показывает соответствует коэффициенту диффузии, равному $D_0 = 1.3 \cdot 10^{-6} \text{ см}^2\text{с}^{-1}$. Серые круги показывают результаты симуляции, полученные с помощью анализа среднего квадрата смещения. Серая штриховая прямая показывает аппроксимацию этих данных, дающую $D_0 = 1.12 \cdot 10^{-6} \text{ см}^2\text{с}^{-1}$.

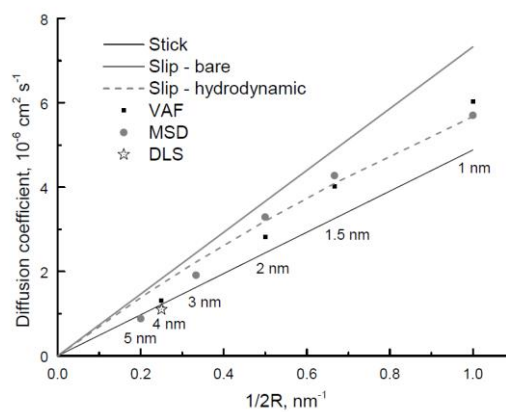


Рис. 8. Зависимость коэффициента диффузии наночастиц от их размера $2R$. Черной и серой прямыми обозначены предсказания соотношения Стокса-Эйнштейна с граничными условиями прилипания и скольжения соответственно и использованием собственного размера частицы. Серая штриховая линия соответствует соотношению Стокса-Эйнштейна с граничными условиями скольжения и использованию гидродинамического радиуса частицы. Черными квадратами показаны результаты расчетов, соответствующих анализу среднего квадрата смещения, а серыми кругами – результаты расчетов, полученные по автокорреляционной функции скорости. Звездочкой показаны данные обработки эксперимента по динамическому световому рассеянию для суспензии 4 нм детонационных наноалмазов.

Главным выводом главы, иллюстрируемым рисунком 8, является то, что для частиц размером более 3 нм, в том числе для большинства типов ультрадисперсных алмазов, соотношение Стокса-Эйнштейна выполняется с высокой точностью. В частности, его точность оказывается достаточной для корректного определения размером наночастиц методом динамического светового рассеяния. Возможные ошибки сопутствующие этому методу будут происходить из других факторов, таких как отклонение формы частиц от

сферической, неунимодальность их распределения по размерам, взаимодействие между частицами, ошибки при математической обработке.

В четвертой главе изучаются оптические и колебательные свойства графена. В рамках стандартного для физической кинетики подхода для описания фононной и электронной подсистем графена [12] вычисляется вклад в термоэлектродвижущую силу в графене от увлечения электронов фононами и производится его сравнение с диффузионным вкладом. Рассматриваются температуры от температуры жидкого азота до комнатной, при которых заполненными оказываются все фононные моды в графене. Полученное выражение для вклада увлечения фононами в термоэдс в графене выглядит следующим образом:

$$S_{ph} = \frac{\pi^4 k_B \hbar \tau_{ph}}{2e M a_0^2} \left(\frac{D}{\hbar v_F \pi / a_0} \right)^2 \left(\frac{\varepsilon_F}{\hbar v_F \pi / a_0} \right)^2, \quad (5)$$

где D – амплитуда электрон-фононного матричного элемента, a_0 – постоянная решетки графена, τ_{ph} – время жизни фонона в образце, M – масса атома углерода. Показывается, что в интервале температур от температуры жидкого азота до комнатной в графене с высокой концентрации носителей и высокой теплопроводностью вклад в термоэлектродвижущую силу от увлечения электронов фононами сравним с диффузионным вкладом (см. рис. 9).

Производится уточнение межатомных силовых констант в графене на основе анализа спектров комбинационного рассеяния. На основе уточненных констант в приближении потенциала деформации [13] вычисляется матричный элемент рассеяния электронов на фононах.

Наконец, производится расчет эффекта выпрямления тока и фотогальванического эффекта в графене при рассеянии носителей на дефектах, обладающих симметрией равностороннего треугольника. В рамках квантовой механики [14] рассматривается асимметричное рассеяние на микроскопическом тримере, состоящем из точечных дефектов, расположенных в вершинах треугольника, и в классическом приближении рассматривается рассеяние на макроскопическом отверстии. Полученные

величины темпа переходов при рассеянии используются в столкновительном интеграле для итерационного решения кинетического уравнения Больцмана. Показывается, что эффект выпрямления тока может быть детектирован в актуальных образцах графена.

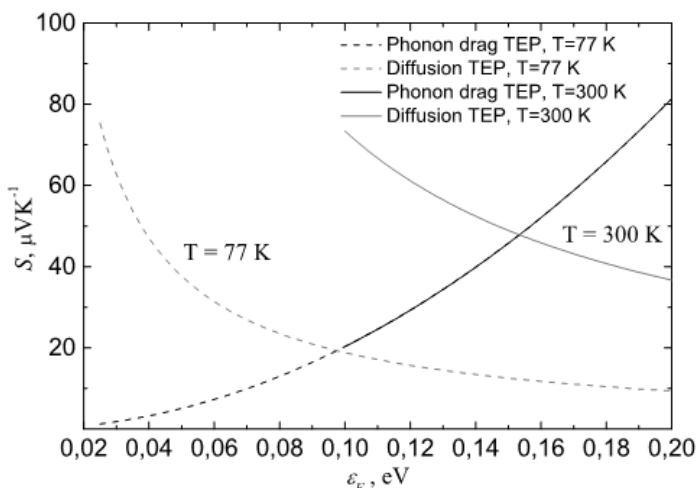


Рис. 9. Зависимости от энергии Ферми двух вкладов в коэффициент Зеебека для образца размером в 2 мкм и режима рассеяния фононов на границе. Сплошные кривые соответствуют комнатной температуре, а именно, сплошная черная линия - вклад фононного увлечения S_{ph} и сплошная серая – вклад от диффузии S_d . Эти зависимости начинаются от 0.1 эВ, тогда приближение вырожденного электронного газа корректно. Пунктирная черная линия - вклад фононного увлечения, пунктирная серая линия – вклад от диффузии при $T = 77$ К.

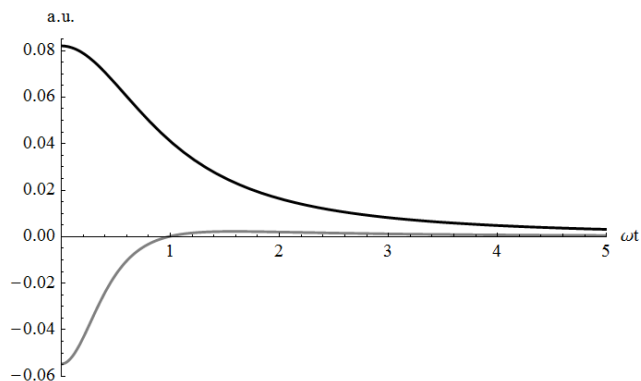


Рис. 10. Зависимость тока хвостика в графене от частоты ω электрического поля при асимметричном рассеянии носителей заряда на когерентно ориентированных тримерах, состоящих из точечных дефектов. Черная кривая соответствует образцу с собственной проводимостью, определяемой кулоновскими дефектам (время релаксации t), а серая – образцу с короткодействующим. Амплитуда приводится в относительных единицах.

В **заключении** перечисляются основные результаты диссертационной работы:

- При использовании распределений по размерам, полученных методом динамического светового рассеяния, рассчитаны спектры

оптической плотности гидрозолей детонационных наноалмазов. На основе сопоставления расчетных и экспериментальных спектров делается вывод о том, что погрешность в определении распределения по размерам алмазных наночастиц в гидrozолях методом динамического светового рассеяния существенно возрастает при наличии крупных (50 нм и более) агрегатов.

- Предложен рецепт для маркировки суспензий детонационных наноалмазов на основе согласования спектров поглощения и рассеяния, рассчитанных в бимодальной модели распределения частиц по размерам, с экспериментальными данными.
- Проанализировано влияние на вид спектров комбинационного рассеяния порошков наноалмазов, рассчитанных в рамках модели фононного конфайнмента, различных факторов, таких как нагрев образцов, возможные механические напряжения, а также, неоднозначности в параметрах модели конфайнмента и в используемой для расчетов дисперсии фононов.
- Учтено влияние конечного времени пробега фононов по нанокристаллиту на уширение максимума в спектре комбинационного рассеяния порошков наноалмазов.
- С помощью симуляции методом молекулярной динамики броуновского движения алмазных наночастиц в воде установлено, что соотношение Стокса-Эйнштейна, связывающее размер частиц и их коэффициент диффузии корректно для частиц размером более 3 нм. В частности, точность соотношения Стокса-Эйнштейна оказывается достаточной для определения размеров наночастиц методом динамического светового рассеяния.
- Произведен расчет вклада в термоэлектродвижущую силу в графене от увлечения электронов фононами. Показано, что при высокой концентрации носителей в графене, обладающим достаточной теплопроводностью, при температурах от температуры жидкого

азота до комнатной вклад от увлечения фононами становится сравним с диффузионным вкладом.

- Произведен расчет матричного элемента электрон-фононного взаимодействия в графене.
- Теоретически изучен эффект выпрямления тока и фотогальванический эффект в графене при асимметричном рассеянии носителей на когерентно ориентированных дефектах, обладающих симметрией равностороннего треугольника.

Список цитируемой литературы

[1] Detonation Nanodiamonds — Science and Applications / Ed. by Alexander Vul' and Olga Shenderova. — PAN STANFORD PUBLISHING, 2013. 400 P. ISBN: 978-981-441-128-8.

[2] Zhu Y., Murali S., Cai W., Li X., Suk J.W., Potts J.R., Ruoff R.S. Graphene and Graphene Oxide: Synthesis, Properties, and Applications // *Advanced Materials*. 2010. Vol. 22, Iss. 46. P. 5226.

[3] Kau R., Badea I. Nanodiamonds as novel nanomaterials for biomedical applications: drug delivery and imaging systems // *Int. J. Nanomedicine*. 2013. Vol. 8. P. 203-220.

[4] Perevedentseva E., Lin Y.-C., Jani M., Cheng C.-L. Biomedical Applications of Nanodiamonds in Imaging and Therapy // *Disclosures Nanomedicine*. 2013. Vol. 8. Iss. 12. P. 2041-2060.

[5] Даниленко, В.В. Из истории открытия синтеза наноалмазов // *Физика Твёрдого Тела*, 2003. Т. 46. Вып. 4. С. 581.

[6] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: Учеб. пособ.: Для вузов. В 10 т. Т. VIII. Электродинамика сплошных сред. —4-е изд., стереот. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. —656 с.— ISBN 5-9221-0123-4 (Т. VIII).

- [7] Поглощение и рассеяние света малыми частицами: Пер. с англ. / К. Борен, Д. Хафмен. –М.: Мир, 1986. – 664 с.
- [8] Richter A.H., Wang Z.P., Ley L. The one phonon Raman spectrum in microcrystalline silicon // Sol. St. Comm., 39, 625-629 (1981).
- [9] Campbell I.H., Fauchet P.M. The effect of microcrystal size and shape on the one phonon Raman spectra of crystalline semiconductors // Sol. St. Comm. 1986. Vol. 58. Iss. 739-741.
- [10] Gromacs 4: Algorithms for highly efficient, load-balanced, and scalable molecular simulation / Berk Hess, Carsten Kutzner, David van der Spoel, Erik Lindahl // Journal of Chemical Theory and Computation. — 2008.
- [11] Yeh I.-C., Hummer G. System-size dependence of diffusion coefficients and viscosities from molecular dynamics simulations with periodic boundary conditions // The Journal of Physical Chemistry B. — 2004. — Vol. 108, no. 40. — P. 15873–15879.
- [12] Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. М., 1978 г., 616 стр. с илл.
- [13] Jiang J., Saito R., Samsonidze G. G., Chou S. G., Jorio A., Dresselhaus G. and Dresselhaus M. S. Electron-phonon matrix elements in single-wall carbon nanotubes // Phys. Rev. B. 2005. Vol. 72. P. 235408.
- [14] Белиничер В. И., Стурман Б. И. Фотогальванический эффект в средах без центра симметрии // УФН. 1980. Т. 130. С. 415–458.

Список опубликованных работ по теме диссертации

- A1. Коняхин С.В., Эйдельман Е.Д. Моделирование поверхности наноалмазных частиц, полученных размалыванием // Вестн. Полоцк. гос. ун-та. Сер. С. Фундаментальные науки. 2007. №9. С. 93-98.

- A2. Vul' A.Ya., Eydelman E.D., Sharonova L.V., Aleksenskiy A.E. and Konyakhin S.V. Absorption and scattering of light in nanodiamond hydrosols // *Diam. Relat. Mater.* 2011. Vol. 20. Iss. 3. P. 279-284.
- A3. Алексенский А.Е., Вуль А.Я., Коняхин С.В., Рейх К.В., Шаронова Л.В., Эйдельман Е.Д. Оптические свойства гидрозолей детонационных наноалмазов // *ФТТ.* 2012. Т. 54. Вып. 3. С. 541-548.
- A4. Koniakhin S.V. Eidelman E.D. Phonon drag thermopower in graphene in equipartition regime *Europhysics Letters.* 2013. Vol. 103. No. 3. ArtNo. 37006.
- A5. Коняхин С.В., Шаронова Л.В., Эйдельман Е.Д. Маркировка суспензий детонационных наноалмазов оптическими методами // *Письма в ЖТФ.* 2013. Т. 39. Вып. 5. С. 35-40.
- A6. Koniakhin S.V. Ratchet effect in graphene with trigonal clusters // *The European Physical Journal B.* 2014. Vol. 87. Iss. 9. P. 216.
- A7. Koniakhin S.V. Eidelman E.D. The electron-phonon matrix element in the Dirac point of graphene. *Nanosystems: physics, chemistry, mathematics.* 2014. Vol. 5. P. 142–147.
- A8. S.V. Koniakhin, I.E. Eliseev, I.N. Terterov, A.V. Shvidchenko, E.D. Eidelman и M.V. Dubina, Molecular dynamics-based refinement of nanodiamond size measurements obtained with dynamic light scattering // *Microfluidics and Nanofluidics.* 2015. Vol. 18. Iss. 5. P. 1189.