

В Диссертационный совет
Д 002.205.02
при ФТИ им.А.Ф.Иоффе РАН
194021, Санкт-Петербург,
ул. Политехническая, д.26.

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Сиклицкой Александры Вадимовны " Особенности трансформации наноалмазов при отжиге", представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников.

Диссертация посвящена выдающемуся представителю полупроводниковых углеродных материалов – алмазу. Широкий круг его применений известен, включая подложки для интегральных микросхем с высочайшей плотностью элементов, что определяется эффективным отводом тепла за счет его высокой теплопроводности; элементов полупроводниковой электроники из допированных различными атомами алмазов. Это придало совсем недавно новый импульс развитию промышленного производства синтетических алмазов. Немаловажное значение имеет выращивание из синтетических алмазов оптических линз большого диаметра (порядка 20 см) для головок переднего обзора ракет и самолетов. Трансформация алмаза, происходящая при температурном воздействии ("отжиге"), является важной для его практических приложений. Этому процессу, обратному зарождению алмаза, и посвящена представляемая диссертация. Поэтому исследование происходящих при отжиге процессов имеет фундаментальное значение, оно служит источником полезной информации об образовании алмазных зародышей, что и определяет как **научную новизну**, так и **практическую значимость** диссертации. Поэтому тема диссертационной работы является **актуальной**.

В настоящее время считается, что при термическом отжиге наноразмерных кристаллов алмаза происходит их трансформация в оболочечные сфероиды с полностью замкнутыми оболочками, называемые зарубежными исследователями онионами (carbon onions). Обзор многочисленных литературных источников показал отсутствие данных о подробных

описаниях трансформации наноалмазов в сфероидные закрученные частицы – углеродные спироиды (по терминологии Е. Осавы, Carbon spirooids). Считалось, что межвитковые расстояния в теоретически описанных Осавой спироидах не зависят от радиуса витка. Требовалось внести ясность в этот процесс.

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, и списка литературы.

Для оценки научной новизны полезно рассмотреть содержание глав.

Во введении обоснованы актуальность и научная новизна работы, приводится информация об апробации. Показана практическая значимость полученных результатов и представлены выносимые на защиту основные результаты и положения.

Первая глава представляет собой литературный обзор, в ней сформулированы цели и задачи исследования. Здесь же приведена информация о методах, применяемых автором: молекулярной динамики - классической (потенциалы Бреннера и Терсоффа) и квантовой (Кар-Парринелло), а также функционала плотности (“квантовые методы”).

Во второй главе определяются начальные и граничные условия моделирования отжига, параметры, необходимые для моделирования, такие как минимальный размер наночастицы алмаза, кристаллографическая огранка, диапазон температур, до которых может разогреться частица, время релаксации в равновесное состояние.

В третьей главе приведены результаты численного моделирования отжига наноалмаза размера 1.3 нм и показано, что в значительной по объему серии численных экспериментов, начиная с определенной температуры отжига, 1135 К, происходит структурное превращение нанокристалла алмаза в спироид. Далее, с использованием квантовых методов, показана устойчивость сформировавшихся спироидов.

В четвертой главе выполнено сравнение спироидов со сфероидами, сравнены результаты оригинального численного и известного из литературы лабораторного экспериментов. На первом этапе для спироида, образовавшегося в численном эксперименте, была рассчитана зависимость межвиткового расстояния от радиуса витка спирали. В отличие от спироидов Осавы, у спироида, образовавшегося при численном моделировании, существует неубывающая зависимость межвиткового расстояния от радиуса витка. В этой же главе проведено сравнение этой зависимости с известными из литературы исследованиями материалов, содержащих наноалмазы. Получено хорошее совпадение между поведением этой

зависимости в модельных спироидах и лабораторно полученных сфероидальных наночастицах. Здесь же приведены некоторые данные по статистике межслоевых расстояний в наноалмазах, подвергнутых отжигу в лабораторных и космических условиях. Зависимости межслоевых расстояний от радиуса слоя в них следуют тенденции, подобной наблюдаемой в диссертации модельных спироидах.

В заключении сформулированы выводы ко всей работе.

Итак, кратко **научную новизну** результатов, изложенных в главах, можно свести к тому, что **впервые**:

1. Из анализа спектров комбинационного рассеяния углеродного "досолнечного" метеорита выполнена оценка размера нанокристаллов алмаза, присутствующих в веществе метеорита, которая использовалась для задания размера нанокластера алмаза при моделировании.
2. Путем моделирования процессов отжига наноалмазов размером 1.3 нм в диапазоне температур от 2.7 К до 2000 К с помощью метода классической молекулярной динамики показано, что при отжиге происходит трансформация наноалмазов в углеродные спироиды. Кроме того, **впервые** исследована устойчивость спироидов с помощью метода функционала плотности.
3. Проведено количественное сравнение сфероидов, синтезированных в лаборатории и спироидов, полученных в условиях численного эксперимента.

Научная новизна и **достоверность** результатов исследования не вызывают сомнения, так как обеспечиваются применением современных методов исследования и анализа полученных результатов, воспроизводимостью результатов в значительной по объему серии численных экспериментов.

По работе можно высказать следующие замечания:

1. В диссертации желательно было привести результаты тестов используемого программного обеспечения, также в ней отсутствует детальное описание программы визуализации результатов моделирования.
2. Несколько в отрыве от основного содержания диссертации выглядят Приложения к диссертации.
3. Не уделено внимание калибровке потенциала межатомного взаимодействия (потенциал Терсофа), использованного в рамках метода молекулярной динамики.

Высказанные замечания не являются принципиальными и не влияют на общую положительную оценку работы, поэтому могут быть учтены при подготовке доклада.

Автореферат полно отражает содержание диссертации. Она является законченным научным трудом по актуальной тематике, основные результаты которого опубликованы в высокорейтинговых научных журналах из Перечня ВАК и представлены на ведущих конференциях по ее проблематике. Научные положения обоснованы и достоверны.

Диссертационная работа А.В.Сиклицкой полностью соответствует требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям в соответствии с п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней» (Постановление Правительства РФ от 24.09.2013 № 842), а ее автор – Сиклицкая Александра Вадимовна, безусловно, заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников.

20.02.2015

Официальный оппонент:

Чернозатонский Леонид Александрович

доктор физико-математических наук, профессор,
главный научный сотрудник отдела новых методов
биохимической физики Федерального
государственного бюджетного учреждения науки
Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля
РАН

119334, Россия, Москва, ул. Косыгина, 4.

Телефон: 8(495) 9397172

Электронная почта: cherno@sky.chph.ras.ru

Л.А. Чернозатонский