

“УТВЕРЖДАЮ”

Зам.директора по научной работе
НИЦ «Курчатовский институт»
Петербургский институт ядерной
физики им. Б.П. Константинова
С. В. Саранцева

3 "марта 2016 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации ФГБУ "Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова" на диссертацию Коняхина Сергея Васильевича "Исследование колебательных и оптических свойств углеродных наноструктур", представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Диссертация посвящена актуальным проблемам современной физики углеродных структур и ориентирована на физические задачи, важные для надежной интерпретации данных, полученных в ходе исследования наноалмазов и графена.

Проведенные исследования являются весьма **актуальными**, т.к. углеродные наноструктуры начинают активно применять в технике, и необходима прочная теоретическая база для методов определения их свойств и электронных приборов на их основе.

Целью работы является развернутый анализ колебательных и оптических свойств углеродных наноструктур и решение комплекса связанных с этим задач. Сюда относится изучение условий применимости и возможностей метода динамического светового рассеяния для определения размеров алмазных наночастиц в гидрозолях в сочетании с комбинационным рассеяния света для определения размеров частиц в порошках наноалмазов, вклад эффекта увлечения электронов фононами в термоэлектрические свойства графена, расчеты матричного элемента электрон-фононного взаимодействия в графене, характеристик эффекта выпрямления тока и фотогальванического эффекта в графене при рассеянии носителей заряда на потенциале треугольной формы, анализ данных динамического и статического рассеяния света, рамановского (комбинационного) рассеяния света с целью определения размеров алмазных наночастиц, теоретическое рассмотрение термоэлектрических свойств и фотогальванического эффекта в графене.

Исследование углеродных наноструктур с различных точек зрения является несомненным достоинством работы. В частности, в диссертации были решены несколько разноплановых задач, относящихся к изучению детонационных наноалмазов и графена. Рассмотренные автором задачи органично объединены заявленной темой изучения колебательных и оптических свойств углеродных наноструктур.

Новизна работы заключается, во первых, в глубоком анализе применимости метода динамического светорассеяния для определения размеров наночастиц в целом и наноалмазов в частности. Ранее результатам этого метода доверяли без дополнительной проверки. С.В. Коняхин предложил дополнить измерения методом динамического светорассеяния спектрометрическими экспериментами в рамках статического светорассеяния. Это позволило скорректировать данные о концентрации крупных частиц в случае широких распределений частиц по размерам. При анализе спектров рамановского (комбинационного) рассеяния света в порошках детонационных наноалмазов диссертант дополнил широко применяемую модель фононного конфайнмента учетом влияния конечного времени пробега фонона по нанокристаллиту. Исследуя графен, диссертант впервые рассмотрел асимметричное рассеяние на потенциале симметрии равностороннего треугольника и применил полученное сечение для расчетов фотогальванического эффекта и эффекта храповика в графене, что важно для создания электронных приборов на базе графена.

Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения и списка литературы.

Во введении обоснованы актуальность и цели исследований, сформулированы положения, выносимые на защиту. **Первая глава** диссертации посвящена расчету спектров оптической плотности (спектров экстинкции) гидрозолей детонационных наноалмазов и их сравнению с экспериментальными спектрами. С.В. Коняхин подробно анализирует применимость обычного дипольного приближения и сравнивает его предсказания с теорией Ми. Главным результатом главы является заключение о том, что метод динамического светорассеяния завышает долю агрегатов наноалмазов с размером около 50 нм. Диссертант предлагает здесь рецепт маркировки порошков наноалмазов в рамках бимодальной модели.

Во **второй главе** диссертации исследованы спектры рамановского (комбинационного) рассеяния в порошках наноалмазов, дан всесторонний анализ модели т.н. фононного конфинмента. С.В. Коняхин предложил учитывать вклад конечного времени пробега фононов по нанокристаллиту в уширение рамановского пика. Автором показано, что расчеты в такой модифицированной модели конфинмента лучше воспроизводят экспериментальные спектры.

Третья глава диссертации посвящена исследованию границы применимости соотношения Стокса-Эйнштейна, позволяющего вычислить коэффициент диффузии частицы в растворителе по ее размеру и вязкости среды. Применение соотношения Стокса-Эйнштейна используется для получения распределений по размерам частиц методом динамического светорассеяния. Методом полноатомной молекулярной динамики проводится симуляция броуновского движения алмазных наночастиц в воде. Результатом анализа является важный вывод, что нижняя по размеру наночастиц граница применимости соотношения Стокса-Эйнштейна составляет 3 нм, и таким образом, точность определения размеров подобных частиц методом динамического светорассеяния ухудшаться не будет.

Четвертая глава диссертации посвящена анализу колебательных и оптических свойств графена. Здесь вычислен матричный элемент электрон-фононного взаимодействия в графене как функции волновых векторов. Рассмотрен эффект увлечения электронов фононами и показано, что при определенных условиях вклад в термоэдс от увлечения фононами превысит диффузионный вклад. Изучено асимметричное рассеяние в графене на дефектах симметрии равностороннего треугольника. Такое рассеяние приводит к фотогальваническому эффекту и эффекту храповика, и диссертант приводит численные оценки для достижимого фототока.

К недостаткам работам можно отнести лишь небольшие неточности:

1. Используемая в главе 1 модель частицы с алмазным ядром и графитоподобной оболочкой больше применима для описания т.н. луковичных углеродных структур.
2. Подпись к рисунку 1.15 находится на соседней странице.
3. При построении диссертации было бы логичным гл. 3 поставить в качестве 2-ой гл., т.к. в обеих главах основное внимание уделено методу динамического светового рассеяния как инструмента измерения размеров наноалмазов.

Замечания не снижают общий высокий уровень диссертации. Представленные в ней результаты хорошо известны специалистам, неоднократно докладывались на конференциях. Научные положения и результаты диссертации хорошо аргументированы и обоснованы, подходы к решению задач тщательно продуманы. Полученные результаты вносят существенный вклад в теоретическое развитие методов характеристики углеродных наноматериалов.

Результаты диссертации могут быть рекомендованы к использованию в ФТИ им. А.Ф.Иоффе РАН, ИХФ РАН, МГУ, СПбГУ, ОИЯИ, «ГНЦ РФ - ФЭИ», ФИАН, НИЦ "Курчатовский институт".

Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

Диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, а её автор, Коняхин Сергей Васильевич, безусловно заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния.

Доклад С.В. Коняхина заслушан и обсужден на научном семинаре по физике конденсированного состояния ПИЯФ НИЦ КИ, 25 июня 2015 г.

Отзыв утверждён на общеинститутском семинаре по Физике конденсированного состояния ФГБУ "Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова" 04 февраля 2016 года.

Ведущий научный сотрудник
ФГБУ ПИЯФ НИЦ КИ
доктор физ.-мат. наук

Д.Н. Аристов

Зав. лабораторией нейтронных
физико-химических исследований,
ведущий научный сотрудник
ФГБУ ПИЯФ НИЦ КИ
доктор физ.-мат. наук

В. Т. Лебедев