

ОТЗЫВ

официального оппонента о диссертационной работе

Коняхина Сергея Васильевича на тему:

ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СВОЙСТВ

УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР,

представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Актуальность темы работы. Уникальные физико-химические и электронные свойства наноструктур на основе углерода сделали их на сегодняшний день самыми перспективными материалами для новой техники и электроники. Осуществляя эту перспективу, в мире работает большое число научно-исследовательских групп, с каждым днем растет число публикаций, воплощаются в практику идеи, но еще больше возникает проблем, которые нуждаются в решении для того, чтобы, например, стала реальностью быстродействующая «графеновая» электроника. В связи с этим актуальность настоящего исследования, посвященного теоретическому осмыслению свойств алмазных и графеновых наноструктур и возможностей практической реализации новых методических подходов для их характеризации, действительно несомненна.

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

Во введении обоснованы актуальность и цели исследований, сформулированы положения, выносимые на защиту. Показана научная новизна полученных результатов и их практическая значимость.

Первая глава диссертации посвящена расчету спектров оптической плотности (спектров экстинкции) гидрозолей детонационных наноалмазов и сравнению их с экспериментально полученными спектрами. При расчетах использовались распределения частиц по размерам, полученные методом динамического светорассеяния. Поглощение в гидрозолях рассчитывалось в предположении о наличии в составе алмазных наночастиц графитоподобной фазы. Для расчетов рассеяния использовалось дипольное приближение и теория Ми.

Анализ распределения частиц по размерам показал, что метод динамического

светорассеяния завышает долю агрегатов наноалмазов с размером около 50 нм, что видно по рассогласованию расчетных и экспериментальных спектров оптической плотности. Этот вывод работы является очень существенным для получения достоверной величины распределения частиц по размерам. Предложенное диссертантом решение этой задачи поясняется в последующей главе.

Сопоставление результатов расчета с экспериментальными данными убедительно демонстрирует сложную структуру алмазной наночастицы, которая представляет собой алмазное ядро в оболочке из графитоподобного слоя. В работе сделана оценка его толщины, которая позволяет предположить графеновую природу слоя. Надо отметить, что это один из самых интересных **новых** выводов диссертационного исследования, который, безусловно, послужит отправной точкой новым исследованиям как экспериментальным, так и теоретическим. Учесть роль межфазной границы алмаз-графен потребуется и для практического применения гидрозолей.

Во второй главе всесторонне анализируется модель конфайнмента фононов, объясняющая асимметричное уширение и сдвиг рамановских пиков в спектрах нанокристаллитов по сравнению с объемным материалом. С учетом предложенной диссидентом идеи о конечном времени пробега фонона по нанокристаллиту модель была модифицирована. Проведенный анализ экспериментально полученных спектров комбинационного рассеяния **также выявил наличие в детонационных наноалмазах графитоподобной фазы**.

Третья глава диссертации посвящена проверке применимости для наночастиц соотношения Стокса-Эйнштейна, которое позволяет вычислить коэффициент диффузии частицы в растворителе, зная ее размер, а также вязкость среды. В главе описывается применение полноатомной молекулярной динамики для симуляции броуновского движения алмазных наночастиц различного размера в воде. В качестве главного вывода главы делается заключение о том, что нижняя по размеру наночастиц граница применимости соотношения Стокса-Эйнштейна составляет 3 нм, и делается **вывод о достаточной точности определения размеров подобных частиц методом динамического светорассеяния**.

Четвертая глава диссертации посвящена исследованию графена, его

колебательных и оптических свойств. Рассматривается эффект увлечения электронов фононами, а также асимметричное рассеяние в графене на дефектах симметрии равностороннего треугольника. В рамках физической кинетики показывается, что такое **асимметричное рассеяние приводит к фотогальваническому эффекту**. Рассматривается рассеяние как в классическом приближении, так и в квантовомеханическом. Приводятся численные оценки для фототока.

Новизна работы определяется основными полученными результатами и выводами, в полной мере отражающими главные достижения работы: анализ применимости метода динамического светорассеяния для получения распределений наноалмазов в гидрозолях по размерам; усовершенствование модели фононного конфайнмента, применяемой для анализа рамановских спектров нанокристаллитов, в том числе наноалмазов; доказательство достаточной точности соотношения Стокса-Эйнштейна для исследований методом динамического светорассеяния частиц с размером в единицы нанометров; расчет вклада от увлечения электронов фононами в графене в его термоэдс; наконец, расчет фотогальванического эффекта в графене при асимметричном рассеянии электронов на дефектах симметрии равностороннего треугольника.

Все защищаемые положения диссертации сформулированы на основании полученных диссидентом **новых заключений**.

Практическая значимость выводов и заключений работы определяется практической важностью объектов исследования, но особо обращает на себя внимание – предложенный диссидентом простой рецепт маркировки гидрозолей детонационных наноалмазов на основе анализа их спектров поглощения и рассеяния. Применение этих достаточно простых оптических методов обосновано в работе для характеристики очень важных в практическом отношении материалов.

Достоверность работы обусловлена аккуратным использованием существующих методов теоретической физики, грамотным сопоставлением с качественными экспериментальными результатами характеристики объектов исследования, а также последовательным и обоснованным развитием

собственных идей диссертанта.

Результаты диссертационной работы могут быть использованы как в фундаментальных научных исследованиях, так и в прикладных разработках в области физики конденсированного состояния, ведущихся в Институте Общей Физики им. А.М. Прохорова РАН, (г. Москва), Московском и Санкт-Петербургском Государственных университетах, РНЦ «Курчатовский институт» (г. Москва), Институте кристаллографии РАН (г. Москва), Институте физики твердого тела РАН (г. Черноголовка Московской обл.), Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе РАН (Санкт-Петербург), Институте физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Институте химической физики им. Н.Н. Семенова РАН и в других организациях, ведущих разработки в области углеродных наноматериалов.

Диссертация не лишена некоторых недостатков. По тексту работы возникает ряд вопросов и замечаний:

1. Все выводы и заключения сделаны для каждой отдельной главы и не объединены общим заключением, поэтому в целом интересная и важная работа не создает впечатления полной целостности
2. В связи с выше отмеченным обращает на себя противоречие первой и третьей глав. Если в первой показывается наличие графитоподобной оболочки, то в третьей, где рассматриваются диффузионные процессы алмазных частиц, в которых взаимодействие с жидкостью происходит через межфазную границу, о графитоподобной оболочке вообще речи нет.
3. Какова погрешность определения суммарной площади поверхностного слоя алмазных ядер в экспериментах, где анализ дает не полное покрытие их графитоподобной оболочкой?
4. Остается не ясной перспектива практического использования эффекта увлечения электронов фононами в графене; эффекта выпрямления тока и фотогальванического эффекта в графене при асимметричном рассеянии носителей на дефектах, обладающих симметрией равностороннего треугольника.

Замечания не умаляют научной и практической значимости диссертации, выполненной на высоком уровне, обеспечивающем достоверность результатов.

Полученные автором результаты достоверны, выводы и защищаемые положения обоснованы. Диссертация логично построена и аккуратно оформлена. По каждой главе сделаны четкие выводы.

Автореферат соответствует основному содержанию диссертации. Результаты прошли **апробацию** на всероссийских и международных конференциях и опубликованы в 7 статьях в рецензируемых научных журналах с хорошим индексом цитирования, что является подтверждением того, что исследования проведены на высоком мировом уровне.

Заключение. Таким образом, диссертация Коняхина Сергея Васильевича «Исследование оптических и колебательных свойств углеродных наноструктур» полностью удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям, и соответствует п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842, а ее автор заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «физика конденсированного состояния».

Официальный оппонент,

доктор физико-математических наук, профессор

Адамчук Вера Константиновна

Адрес: ул. Ульяновская, д. 1, г. Петергоф, г. Санкт-Петербург, 198504, Россия

Телефон: +7 (812) 428 4369

E-mail: ykadamchuk@mail.ru

Должность: главный научный сотрудник

Подразделение: кафедра Электроники Твердого Тела, физический факультет

Организация: федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» (СПбГУ)