

«УТВЕРЖДАЮ»

Зам. Директора по научной работе  
Федерального государственного  
бюджетного учреждения

«Петербургский институт ядерной  
физики им. Б.П. Константинова

Национального исследовательского  
центра «Курчатовский институт»

С.В. Саранцева

«\_\_» \_\_\_\_\_ 2017

## ОТЗЫВ

ведущей организации ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова» на диссертацию Мейлахса Александра Павловича «Электрон-фононное взаимодействие на границе металл-диэлектрик в композитах на основе 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 передачи энергии через границу металл-диэлектрик и ориентирована на физические задачи, наиболее важные для объяснения свойств углеродных наноструктур.

Проведенные исследования являются весьма **актуальными**, т.к. нанокompозитные материалы на основе углерода активно применяются в технике и необходима прочная теоретическая база для расчета их кинетических характеристик и создания приборов на их основе.

**Целью** представленной работы является исследование кинетических свойств нанокompозитных материалов и решение ряда возникающих в связи с этим задач. Сюда относится, например, расчет амплитуды прохождения фонона через границу кристаллов, с учетом атомарной структуры границы; расчет граничного теплосопrotивления (сопротивления Капицы), возникающего, за счет отражения фононов на границе, для границ различных материалов; вычисление дополнительного вклада в сопротивление

Капицы, возникающего на границе металл-диэлектрик за счет неравновесности температур электронной и фононной подсистем; учет влияния границ на теплопроводность, термоэлектрическую эффективность нанокompозитных материалов и оптические свойства частиц наноалмаза.

Рассмотренные задачи органично объединены заявленной автором темой изучения электрон-фононного взаимодействия на границе металл-диэлектрик в композитах на основе углеродных наноструктур.

**Новизна работы** заключается, во-первых, в предложенном А.П. Мейлахсом новом подходе к расчету граничного теплосопrotивления, заключающегося в обобщении метода расчета кинетических коэффициентов Энскога-Чепмена на случай границы двух сред, в частности, границы металл-диэлектрик. В методах, применявшихся ранее для решения этой задачи, неравновесность функции распределения фононов при тепловом потоке через границу металл-диэлектрик не учитывалась. Впервые исследовано влияние рассогласования кристаллических решеток на прохождение фонона через границу. Показано, что, рассогласование кристаллических решеток приводит к тому, что коэффициент прохождения поперечно поляризованных фононов через границу выше, чем у продольно поляризованных. Эти результаты позволяют существенно увеличить точность расчета сопротивления Капицы на границе металл-диэлектрик, что, в свою очередь, позволяет объяснить и предсказать многие свойства углеродных наноструктур. Также впервые рассмотрено влияние дискретности спектра колебаний наночастиц на форму пика Рамановского рассеяния, что важно для анализа спектров комбинационного рассеяния света наночастицами.

**Диссертация** состоит из введения, 5 глав, заключения и списка литературы.

**Во введении** обоснована актуальность исследований, сформулированы цели работы и положения, выносимые на защиту. Показана научная новизна полученных результатов и их практическая значимость. **Первая глава** диссертации посвящена изучению простейшей модели границы между двумя кристаллами, учитывающей атомарную структуру границы – двум, связанным на границе, полубесконечным цепочкам атомов. На примере этой модели рассматривается задача о нахождении амплитуд прохождения и отражения фонона на границе кристаллов. Поставленная задача решена аналитически.

Найден новый тип затухающих вглубь от границы колебаний, возникающих в том случае, когда со стороны данного кристалла на границу падает фонон с частотой большей,

чем максимальная частота колебаний другого кристалла. Предложен новый механизм передачи тепла через границу металл-диэлектрик, связанный с электрон-фононным взаимодействием вблизи границы кристаллов.

Во **второй главе** производится исследование трехмерной модели границы кристаллов – границы двух простых кубических решеток, в каждой из которых учитывается только взаимодействие атома с атомами первых двух координационных групп. При этом, отношение постоянных решеток кристаллов предполагается произвольным.

Диссертант показал, что продольно поляризованные фононы имеют много меньший коэффициент прохождения через границу, чем поперечно поляризованные. Это приводит к тому, что вычисляемое сопротивление Капицы увеличивается приблизительно в три раза. Кроме того, показано, что рассогласование кристаллических решеток, даже при отсутствии дефектов, приводит к рассеянию фононов на границе.

**Третья глава** диссертации посвящена расчету граничного теплосопrotivления в одномерном случае. Приводится обобщение метода Чепмена-Энскога, на случай границы двух кристаллов. Предложенный метод позволяет учесть неравновесность функции распределения фононов при тепловом потоке через границу кристаллов, ввести корректное определение температуры вблизи границы. Рассчитанное предложенным А.П. Мейлахс методом сопротивление Капицы, лучше согласуется с экспериментом, чем рассчитанное по общепринятым формулам.

**Четвертая глава** посвящена изучению переноса тепла через границу в трехмерном случае. Метод расчета граничного теплосопrotivления, предложенный в предыдущей главе, обобщается на трехмерный случай.

Отдельно рассматривается случай границы металла и диэлектрика. Показывается, что вследствие того, что электроны вовлекаются в перенос тепла только на некотором расстоянии от границы, тепло вблизи границы переносится не оптимально. Это приводит к дополнительному эффективному вкладу в сопротивление Капицы. Данный вклад не зависит от типа диэлектрика, с которым граничит металл, что позволяет объяснить результаты эксперимента, по измерению теплосопrotivления границы нитрида титана с тремя различными диэлектриками. В этом эксперименте сопротивление Капицы было одинаковым для всех трех границ, что и предсказывает теория, развитая диссертантом.

**В пятой главе** А.П. Мейлахс применяет развитую ранее теорию для исследования кинетических свойств нанокompозитных материалов. Предсказывается, что наноструктуры на основе углерода могут обладать рекордным значением термоэлектрического параметра, что важно для создания эффективного термоэлектрического генератора.

К недостаткам работы можно отнести лишь небольшие огрехи:

1. Не вычислен потенциал взаимодействия атомов, находящихся по разные стороны границы кристаллов.
2. Не вполне понятно, как именно результаты вычисления сопротивления Капицы в одномерной цепочке переносятся на трехмерный случай
3. В задаче вычисления теплопроводности углеродных наноструктур считается, что между алмазоподобными областями находится графит, в то время, как правильнее было бы считать, там находится аморфный углерод.

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. Подход к решению задач тщательно продуман. Полученные результаты вносят существенный вклад в развитие теории теплосопrotivления на границе металл-диэлектрик и в исследование свойств углеродных наноструктур.

Результаты диссертационной работы могут быть рекомендованы к использованию в ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, МГУ, СПбГУ, НИЦ «Курчатовский институт», ИК РАН, ИФТТ РАН, ОИЯИ, ФИАН, ИХФ РАН и в других организациях, ведущих разработки в области углеродных наноматериалов.

Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

Диссертация «Электрон-фононное взаимодействие вблизи границы металл-диэлектрик в композитах на основе углеродных наноструктур» полностью удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям, а ее автор Мейлахс

Александр Павлович, безусловно заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «физика конденсированного состояния», а ее автор заслуживает присуждения ему искомой им ученой степени.

Доклад А.П. Мейлахса заслушан и обсужден на научном семинаре по физике конденсированного состояния ПИЯФ НИЦ КИ, 20 апреля 2017.

Отзыв утвержден на общеинститутском семинаре по Физике конденсированного состояния ФГБУ "Петербургский институт ядерной Физики им. Б.П. Константинова" 27 апреля 2017.

Ведущий научный сотрудник  
НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ  
Доктор физ.-мат. наук

Сыромятников А.В.

Зав. Лабораторией нейтронных,  
физико-химических исследований  
Ведущий научный сотрудник  
НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ  
Доктор физ.-мат. наук

Лебедев В.Т.