

## Отзыв официального оппонента

**на диссертационную работу Мейлахса Александра Павловича «Электрон-фононное взаимодействие вблизи границы 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**

Проблема переноса тепла в неоднородных средах, таких как нанокompозитные материалы, имеет принципиальную важность как с точки зрения фундаментальных исследований в области физики твердотельных наноструктур, так и для создания нанокompозитов для эффективного отвода тепла от различных электронных устройств, например, от компьютерных процессоров и полупроводниковых лазеров, нового поколения приборов для передачи и обработки информации и т.д. Принципиальным препятствием к построению теории переноса тепла в неоднородных средах является проблема теплосопrotивления на границе между фазами, или сопrotивления Капицы. Законченная теория процессов переноса тепла в нанокompозитах в настоящее время отсутствует. Поэтому тема диссертации, посвященной теоретическому исследованию электрон-фононного взаимодействия вблизи границы металл-диэлектрик в композитах на основе углеродных наноструктур, представляется несомненно актуальной.

Практическая значимость работы состоит в том, что в ней определены свойства границы кристаллов, которые позволяют добиться оптимального теплосопrotивления в композитном материале. В частности, на основе проведенных теоретических исследований, предложен новый дизайн термоэлектрических преобразователей с рекордным термоэлектрическим параметром.

Диссертационная работа состоит из введения, пяти содержательных глав, заключения и списка литературы. По материалам диссертации опубликованы 14 работ, в том числе 6 статей в изданиях, входящих в перечень научных изданий ВАК – две статьи в Письмах в ЖЭТФ, одна – в ФТП, одна – в Письмах в ЖТФ и две – в издании «Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics».

Основные содержание диссертации и полученные результаты таковы:

В первой главе диссертации рассматривается простейшая модель границы между двумя кристаллами – две полубесконечных одномерных цепочки атомов соединенных на границе. На примере этой модели рассматривается постановка задачи о прохождении фонона через границу кристаллов. Поставленная задача решается аналитически, приводятся новые точные выражения для амплитуд отражения и прохождения фононов. Найден новый тип затухающих колебаний кристаллической решетки вблизи границы кристаллов. Предложен новый механизм передачи тепла через границу металл-диэлектрик за счет взаимодействия электронов металла с затухающими колебаниями кристаллической решетки.

Во второй главе производится теоретическое исследование более сложной модели границы кристаллов – двух кубических решеток, разделенных плоскостью (100). При этом, постоянные решеток предполагаются произвольными. Показано, что смещения атомов на границе, вызванные взаимным влиянием кристаллов друг на друга, не влияют на уравнения движения решетки в гармоническом приближении. Показано, что рассогласование кристаллических решеток приводит к упругому рассеянию фононов на границе, а коэффициент прохождения поперечно поляризованных фононов через границу выше, чем у продольно поляризованных.

В третьей главе рассчитывается граничное теплосоппротивление (сопротивление Капицы) в модели одномерной цепочки. Объясняется некорректность общепринятого подхода, в котором не учитывается принципиальная неравновесность функции распределения фононов при тепловом потоке вблизи границы. Предлагается новый метод расчета, который обобщает общеизвестный метод расчета кинетических коэффициентов в однородных средах (Чепмена-Энскога), на случай границы сред. Выводятся условия сшивки функций распределения фононов на границе. Выводится аналитическое выражение для сопротивления Капицы  $r$  в одномерной цепочке.

Четвертая глава посвящена изучению переноса тепла через границу в трехмерном случае. Выводятся условия сшивки функций распределения фононов на границе в трехмерном случае. Отдельно рассматривается случай границы металла и диэлектрика. Показывается, что вследствие того, что тепло через границу переносится только фононами, а электроны не проходят через границу, температуры и градиенты температур фононов и электронов вблизи границы различны. Так как электроны вовлекаются в перенос тепла только на некотором расстоянии от границы, вблизи границы перенос тепла осуществляется не оптимально, что приводит к дополнительному вкладу в сопротивление Капицы.

В пятой главе развитая ранее теория применяется для теоретического исследования кинетических свойств нанокompозитных материалов и оптических свойств наночастиц. Производится сравнение механизмов теплосопротивления в композитах, полученных при спекании микроалмазов с композитами на основе наноалмаза. На основе анализа имеющихся экспериментальных данных, делается вывод о том, что основным механизмом теплосопротивления в углеродных наноструктурах, полученных спеканием наноалмазов, является теплосопротивление на границах между графитоподобной и алмазоподобной фазами. Предсказывается, что углеродные наноструктуры могут обладать рекордным значением термоэлектрического параметра, за счет баллистического увлечения электронов фононами и нарушения в таких структурах закона Видемана-Франца, являющегося универсальным ограничителем термоэлектрической эффективности. Предлагается новая модель, объясняющая уменьшение частоты пика комбинационного рассеяния света в наноструктурах, дискретностью колебательного спектра наноструктур. Предложенная модель с высокой точностью воспроизводит результаты многочисленных экспериментов.

В заключении диссертации подводятся итоги работы, кратко излагаются основные результаты диссертационной работы.

Все полученные в диссертации результаты являются новыми.

Исследование проведено на высоком научном уровне, с использованием современных теоретических подходов, аналитических методов исследования, проведено сравнение предсказаний теории с экспериментальными данными и показано их хорошее соответствие, что демонстрирует высокий уровень квалификации автора. Диссертация написана грамотным научным языком, ее приятно читать.

По диссертации имеются следующие замечания:

- 1) При рассмотрении во второй главе гармонического приближения для учета рассогласования решеток и возникающих вследствие этого напряжений и деформаций на границе двух кубических кристаллов следовало бы сделать определенные оговорки. Постоянные решеток уж точно не могут быть «произвольными». Напротив, рассогласование решеток должно быть достаточно малым, иначе в системе возникают сначала упруго-напряженные неоднородные включения, затем дислокации несоответствия, что не описывается линейной теорией упругости.
- 2) В диссертации следовало бы более четко отразить суть метода Чепмена-Энскога в применении для расчета тепловых свойств и, в частности, термосопротивления

Капицы на границе металл-диэлектрик. Данный метод, в общей постановке, применяется для решения кинетического уравнения Больцмана при наличии некоторого малого параметра, определяющего иерархию временных масштабов процесса. Каков этот параметр в рассматриваемой задаче? Это не следует из текста, например, на стр. 52: «В такой ситуации, следуя Энскогу и Чепмену, температуру нужно определять из уравнения (3.3)».

- 3) Название пятой главы, «Применения», представляет собой некоторое преувеличение. Да, в данной главе есть сравнение расчетов с экспериментальными данными, например, по связи теплопроводности и продольной скорости звука для поликристаллических композитов, полученных спеканием алмазных частиц, или по зависимости спектров рамановского рассеяния от размеров наночастицы. Но остальное – это все-таки новые модели и расчеты, а также возможный дизайн структуры для термоэлектрических преобразователей с улучшенными параметрами.

Сделанные замечания имеют частный характер и не меняют общую положительную оценку работы.

Автореферат правильно отражает содержание диссертации.

На основании изложенного, диссертационная работа Мейлахса Александра Павловича «Электрон-фононное взаимодействие вблизи границы металл-диэлектрик в композитах на основе углеродных наноструктур» представляет собой законченное исследование, посвященное актуальной задаче теоретического описания переноса тепла в нанокompозитных материалах. Работа выполнена на высоком профессиональном уровне, ее основные результаты опубликованы в рецензируемых журналах и доложены на международных конференциях. Диссертация удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по указанной специальности.

Доктор физ.-мат. наук,  
профессор

В.Г. Дубровский

5 мая 2017 г.