

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу

Мейлахса Александра Павловича

на тему

«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.

Актуальность темы работы. Уникальные физико-химические и электронные свойства наноструктур на основе углерода сделали их на сегодняшний день перспективными материалами для новой техники и электроники. В мире работает большое число научно-исследовательских групп, разрабатывающих такие материалы, растет число публикаций, начинают воплощаться в практику предлагаемые идеи, но параллельно возникает большое количество проблем, которые нуждаются в решении. В связи с этим актуальность настоящего исследования, посвященного теоретическому анализу свойств границ алмазоподобных (диэлектрик) и графитоподобных (полуметалл) наноструктур и возможностей практической реализации новых методических подходов для использования этих свойств, несомненна. Несомненна и актуальность обобщения обнаруженных свойств на любые границы металл-диэлектрик. Разработка такой проблемы актуальна как для физики твёрдого тела, так и для физики конденсированного состояния в целом.

Диссертация Мейлахса состоит из введения, 5 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.

В первой главе диссертации рассматривается простейшая модель границы между двумя кристаллами – одномерная цепочка атомов с границей. На примере этой модели рассматривается постановка задачи о прохождении фонона через границу кристаллов. Представлено аналитическое решение задачи, приводятся выражения для коэффициентов отражения и прохождения фононов на границе раздела.

Показано, что если со стороны данного кристалла на границу падает фонон с частотой большей, чем максимальная частота колебаний другого кристалла, то возбуждаются затухающие вглубь от границы колебания. Предложен и качественно проанализирован новый механизм передачи тепла через границу металл-диэлектрик, связанный с взаимодействием

электронов с затухающими вглубь от границы колебаниями.

Указанный механизм особенно важен для границ материалов с сильно различными акустическими свойствами, такими, например, как граница алмаза и меди. На таких границах происходит особенно сильное отражение фононов и обычный механизм переноса энергии через границу фононами не объясняет экспериментальные данные. Таким образом, представленный механизм передачи энергии через границу за счет электрон-фононного взаимодействия объясняет особенности теплопроводности композитов наноалмаз-медь.

Во второй главе производится исследование трехмерной модели границы кристаллов на примере двух простых кубических решеток, разделенных плоскостью $(1,0,0)$. 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. Рассматривается падение фонона перпендикулярно плоскости границы без учета рассеяния. Для указанного случая получено точное аналитическое решение. Полученное решение качественно совпадает с решением, полученным для одномерной цепочки, что обосновывает применимость результатов, полученных в Главе 1, к трехмерному случаю. Полученное решение позволяет объяснить, почему поперечно поляризованные фононы имеют много больший коэффициент прохождения через границу, чем продольно поляризованные, что является одним из наиболее важных результатов работы, так как вычисляемое сопротивление Капицы, при учете этого фактора увеличивается приблизительно в три раза.

Далее рассматривается падение фонона на границу под произвольным углом и производится учет рассеяния. На основе анализа делается вывод, что рассогласование кристаллических решеток, даже при отсутствии дефектов, приводит к рассеянию фононов на границе. Кроме этого, вводится общее представление о затухающих вглубь от границы колебаниях, обобщающее рассмотрение известных акустических поверхностных волн и затухающие колебания, описанные в предыдущей главе. Развитая теория применима и для границ в углеродных наноструктурах.

Третья глава посвящена расчету граничного теплосопrotivления в модели одномерной цепочки. Предлагается новый метод расчета, который обобщает общеизвестный метод расчета кинетических коэффициентов в однородных средах, метод Чепмена-Энскога, на случай границы сред. От расчетной формулы, выведенной классическим методом, полученное выражение отличается множителем $(1-t)^{-1}$, где t – коэффициент прохождения фонона через границу. Как видно из приведенной формулы, в случае высоких, близких к единице, коэффициентов прохождения фононов через границу, это различие велико. Рассчитанное предложенным методом сопротивление Капицы оказывается много меньше, чем рассчитанное

по общепринятой формуле, что что также является одним из основных результатов работы.

Четвертая глава посвящена изучению переноса тепла через границу в трехмерном случае.

Метод расчета сопротивления Капицы, предложенный в предыдущей главе, обобщается на трехмерный случай. 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, это приводит к дополнительному вкладу в сопротивление Капицы, который не зависит от типа диэлектрика.

В пятой главе развитые ранее общие представления применяются для теоретического исследования кинетических свойств нанокompозитных материалов. Производится сравнение механизмов теплосопrotивления в композитах, полученных при спекании микроалмазов, с композитами на основе наноалмаза. На основе анализа экспериментальных данных делается вывод о том, что основным механизмом теплосопrotивления в углеродных наноструктурах, полученных спеканием наноалмазов, является теплосопrotивление 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.

Новизна диссертационной работы Мейлахса определяется более детальным учетом кинетики фононов на границе раздела двух сред и состоит кратко в следующем: найден новый тип затухающих колебаний кристаллической решетки вблизи границы кристаллов на примере границы алмаз-медь; 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; предложен новый метод расчета сопротивления Капицы, основанный на обобщении метода Энскога-Чепмена, в сравнении с определяемым в эксперименте значением сопротивления Капицы. Все защищаемые положения диссертации сформулированы на основании полученных диссертантом **новых заключений.**

Практическая значимость выводов и заключений работы определяется практической важностью объектов исследования, но особо обращает на себя внимание предложенный диссертантом простой способ вычисления теплопроводности композитов детонационных наноалмазов.

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 (Москва), Московском и Санкт-Петербургском Государственных университетах, РНЦ «Курчатовский институт» (Москва), Институте кристаллографии РАН (Москва), Институте физики твердого тела РАН (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. Диссертация в целом написана хорошим и правильным языком, но есть ряд ошибок. Так, например, однако в функции союза не отделяется запятой (стр. 5, Введение). Во всем тексте имеются случаи отсутствия нужных запятых, лишних запятых и случаи несогласования членов предложения. В списке литературы (например, 35) даются ссылки на перевод статей на английский, а не на русский оригинал.
2. На стр. 8 два раза повторяется заголовок «Структура и объем диссертации» и приводится краткое изложение содержания по главам, что уместно в автореферате, но является лишним в диссертации. Название раздела 2.7 (Преломление фононов на границе кристаллов) представляется неудачным. Также неудачна характеристика фононов как «частиц с линейным спектром» на стр. 78.
3. Отсутствует детальный вывод соотношения 1.6. Нам же представляется, что этот вывод не вполне ясен, если учесть, что расстояние между пограничными атомами в цепочке между ее двумя частями не вводилось, а оно отличается, очевидно, как от a_1 , так и от a_2 . Также формулировка первого основного результата диссертации (стр.104) не вполне соответствует проведенному чисто качественному анализу передачи энергии от фононов электронам в Главе 1.
4. Утверждение, сделанное для модели в Главе 2, что изменением «постоянных решетки вблизи границы пренебрегаем» (стр. 22) не согласуется с утверждением «кристалл (вблизи раздела) деформируется, положение равновесия атомов сдвигается относительно их положения в идеальном кристалле» (стр. 23). Кроме того, при описании модели вводится очень жесткое условие отсутствия химического взаимодействия между атомами разных кристаллов на границе (стр. 25). Не ясно, как это условие сказывается на выводах на основе такой модели. Это жесткое

условие следовало бы упомянуть при формулировке основных результатов диссертационной работы.

5. В Главе 3 рассматривается теплоперенос через границу раздела в рамках представления о фонах одной частоты. При этом вне рассмотрения оказываются неупругие процессы с изменением частоты фононов. Требуется провести качественный анализ влияния такого приближения на результаты.

Сделанные выше замечания не умаляют научной и практической значимости диссертации, выполненной на высоком уровне. 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 6 статьях в рецензируемых научных журналах с хорошим индексом цитирования, что является подтверждением того, что исследования проведены на мировом уровне.

Заключение. Таким образом, диссертация Мейлахса Александра Павловича «Электрон-фононное взаимодействие вблизи границы металл-диэлектрик в композитах на основе углеродных наноструктур» полностью удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК РФ к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «физика конденсированного состояния», а ее автор заслуживает присуждения ему искомой им ученой степени.

Профессор Физического факультета С. Петербургского государственного университета, доктор физико-математических наук, профессор **Елена Владимировна Чарная**
199034, Санкт-Петербург, Университетская наб. д.7-9.

Тел: +7 (812) 328-20-00. Эл. почта: spbu@spbu.ru. Сайт: spbu.ru