

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Кулеева Ивана Игоревича **«Фокусировка фононов, электронный и фононный транспорт в упруго анизотропных металлических и диэлектрических кристаллах и наноструктурах на их основе»**, представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8.

Физика конденсированного состояния

Диссертационная работа Кулеева И.И. посвящена исследованию влияния упругой анизотропии на электронный и фононный транспорт в металлических и диэлектрических кристаллах кубической симметрии. Исследованы как объёмные, так и для наноразмерные образцы. Упругая анизотропия в кристаллах приводит к ряду новых эффектов в фононном транспорте. Одним из таких эффектов является фокусировка фононов. Из-за неколлинеарности волнового вектора фононов и групповой скорости фононный поток, излучаемый точечным источником тепла, фокусируется вдоль определенных направлений в кристаллической решетке. В случае доминирования граничного рассеяния фононов в кристалле эффект фокусировки приводит к анизотропии теплопроводности. В объемных кристаллах такой режим реализуется в низкотемпературной области, а для наноразмерных образцов в широком температурном интервале - от гелиевых до комнатных. Упругая анизотропия кристалла также приводит к отклонению векторов поляризаций фононов от направления волнового вектора (для продольных фононов) или перпендикулярного к этому направлению (для поперечных) фононов. Поэтому в рамках стандартной теории потенциала деформации они могут взаимодействовать с электронами. Однако при расчетах электросопротивления металлов роль квазипоперечных фононов и сдвиговых волн не учитывалась. Не рассматривались также эффекты, обусловленные анизотропией фононного спектра в металлах на электрон-фононную релаксацию и термоэлектрические явления в металлических монокристаллах и наноструктурах на их основе. Эти проблемы были решены в данной диссертационной работе. В связи с этим, диссертационная работа Кулеева И.И., несомненно, является **актуальной** как с фундаментальной, так и с практической точки зрения.

Анизотропия упругой энергии приводит к возможности взаимодействия квазипоперечных фононов с электронами и вкладу таких процессов рассеяния в электронный транспорт и этот вклад во многих случаях при низких температурах оказывается определяющим. Учет рассеяния электронов на квазипоперечных фононах и анализ его влияния на электронный транспорт проведены впервые и в этом несомненная **новизна** диссертации.

Достоверность полученных в диссертации результатов определяется использованием хорошо апробированных методов расчета электронного и фононного транспорта (метод кинетических уравнений), сравнением результатов расчетов с экспериментальными данными, а также работами по материалам диссертации, опубликованными в ведущих российских и международных научных журналах и монографиях.

Научная и практическая значимость результатов диссертационной работы состоит в том, что учет упругой анизотропии и возникающего вследствие этой анизотропии рассеяния электронов на квазипоперечных фононах позволил существенно приблизить результаты расчетов ряда коэффициентов электронного транспорта (термоэдс увлечения, электросопротивление) для щелочных и благородных металлов к экспериментальным данным. Эта анизотропия приводит к существенной анизотропии фононного транспорта, в частности, коэффициента теплопроводности, что позволило описать эффекты МакКарди в образцах Si и CaF₂ и предсказать величины этих эффектов для большой совокупности монокристаллических образцов с различным типом упругой

анизотропии. Практическая значимость этих результатов для микроэлектроники заключается и в том, что они позволили определить направления осей нанопроводов и ориентации плоскостей пленок для большого набора материалов, которые обеспечивают максимальный теплоотвод от элементов микросхем.

Диссертация состоит из введения, 6 глав, заключения, списка работ автора, списка использованной литературы и одного приложения.

Во введении обоснована актуальность темы, представлены цели и задачи исследования, изложена новизна и практическая значимость работы, отмечен личный вклад автора. Описаны основные положения, выносимые на защиту, представлена структура диссертации.

В первой главе проанализированы динамические характеристики упругих волн в металлических и диэлектрических кристаллах кубической симметрии. Рассчитаны фононные спектры, построены изоэнергетические поверхности, разработана методика определения областей фокусировки и дефокусировки фононов, рассчитаны плотности фононных состояний (ПФС), а также исследованы отклонения векторов поляризаций от чистых мод. Показано, что все кристаллы кубической симметрии, могут быть разделены на два типа: кристаллы с положительной $k-1 > 0$ и отрицательной $k-1 < 0$ анизотропией упругих свойств. Направления фокусировки и дефокусировки фононов в кристаллах одного типа совпадают, тогда как в кристаллах различного типа они противоположны. Показано, что в упруго анизотропных кристаллах максимальные значения ПФС достигаются в областях фокусировки, а минимальные - в областях дефокусировки фононов. Поэтому направления максимумов ПФС в кристаллах первого типа становятся направлениями минимумов в кристаллах второго типа. Этот результат имеет большое значение при анализе анизотропии решеточной теплопроводности в кристаллах.

Во второй главе развит метод расчета температурных зависимостей теплопроводности монокристаллических образцов при учете фокусировки фононов. Решена задача о граничном рассеянии фононов в образцах конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечением. Показано, что использование полученных выражений для скоростей релаксаций фононов на границах позволяет адекватно описать экспериментальные данные по теплопроводности кристаллов Si и CaF_2 с квадратным и прямоугольным сечением в интервале от 3 до 25 К. Проанализированы и рассчитаны оба эффекта МакКарди и дана их физическая интерпретация. Первый обусловлен фокусировкой медленной поперечной моды в кристаллах обоих типов. В кристаллах первого типа фокусировка и максимум теплопроводности достигается в направлении [001], а минимум - в направлении [111], тогда как в кристаллах второго типа - CaF_2 наоборот. Второй эффект обусловлен фокусировкой быстрой поперечной моды в кристаллах обоих типов, приводящей к изменению распределения теплового потока по поперечному сечению образца с прямоугольным сечением. При этом, в кристаллах первого типа (типа Si) теплопроводность для образцов с широкой гранью {001} будет больше, чем для образцов с широкой гранью {110}. Однако в кристаллах второго типа (типа CaF_2) - наоборот.

В третьей главе рассмотрены особенности фононного транспорта в полупроводниковых и диэлектрических наноструктурах с различным типом упругой анизотропии, а также из материалов, используемых для создания спинтронных наноструктур. Определена ПФС и рассчитаны угловые зависимости длин свободного пробега для нанопроводов с квадратным сечением 50 нм. Показано что для поперечных размеров $D < 5 \cdot 10^{-6}$ см реализуется режим кнудсеновского течения фононного газа. В этом случае максимальные длины свободного пробега достигаются в секторах фокусировки, а минимальные в секторах дефокусировки. Построены угловые зависимости длин свободного пробега для пленок с различными геометрическими параметрами. Проанализированы температурных зависимостей теплопроводности гетероструктур GaAs/AlGaAs. Показано, что в интервале от 0.2 до 0.8 К в гетероструктурах GaAs

реализуется случай кнудсеновского течения фононного газа. В этом режиме теплопроводность следует зависимости T^3 и для ориентации плоскости гетероструктур GaAs {100} она в 1.9 раза больше, чем для ориентации {110}. Определение параметра зеркальности рассеяния фононов позволило согласовать результаты расчета с экспериментальными данными.

В четвертой главе исследовано влияние анизотропии упругой энергии на термоэдс увлечения и электросопротивление кристаллов калия. Учтена упругая анизотропия, а также взаимодействие электронов со сдвиговыми волнами. Константа деформационного взаимодействия электронов с фононами бралась в приближении изотропного спектра электронов, а константа взаимодействия со сдвиговыми волнами определялось из согласования результатов расчета теплопроводности и термоэдс с данными эксперимента. Учет релаксации электронов на сдвиговых волнах позволил согласовать температурные зависимости термоэдс калия с различной концентрацией дислокаций с экспериментальными данными в интервале температур 1-3 К. Показано, что вклады медленных квазипоперечных фононов в термоэдс увлечения и электросопротивлении кристаллов калия, которые ранее не учитывались, при температурах, гораздо меньших температуры Дебая $T \ll \theta_D$, на порядок величины превышают вклад продольных фононов.

В пятой главе исследовано влияние фокусировки фононов на термоэдс увлечения в монокристаллических наноструктурах калия при низких температурах $T \ll \theta_D$. Благодаря электрон-фононному взаимодействию анизотропное распределение фононных потоков, соответствующих различным поляризациям, приводит к анизотропии термоэлектрического тока электронов в наноструктурах. Показано, что в наноструктурах с поперечными размерами $D < 5 \cdot 10^{-6}$ см реализуется режим кнудсеновского течения фононного газа. В этом случае анизотропия термоэдс увлечения в наноструктурах калия обусловлена конкуренцией вкладов медленной t_2 -моды и L -фононов. При этом термоэдс увлечения и решеточная теплопроводность нанопроводов и нанопленок анизотропны и следуют зависимостям: $\alpha_{drag}(T) \approx B_2 T^4$ и $\kappa(T) \approx C T^3$. В образцах калия с поперечными размерами $D > 10^{-2}$ см доминируют объёмные механизмы релаксации фононов – рассеяние на электронах и дислокациях. Термоэдс увлечения и решеточная теплопроводность изотропны и следуют асимптотикам: $\alpha_{drag}(T) \approx A T^3$ и $\kappa(T) \approx B T^2$.

В шестой главе исследовано влияние анизотропии упругой энергии на электрон-фононную релаксацию и электросопротивление благородных металлов (БМ) в рамках теории Блоха-Грюнайзена. Рассчитаны спектр, определена плотность фононных состояний и проанализировано влияние фокусировки фононов на электрон-фононную релаксацию в БМ. Были определены вклады различных мод в электросопротивление БМ и показано, что при температурах гораздо меньше температуры Дебая $T \ll \theta_D$ они обратно пропорциональны среднему значению фазовой скорости фононов в шестой степени. Поскольку фазовые скорости квазипоперечных фононов в БМ в 2.5-3 раза меньше, чем для продольных фононов, то их вклады в электросопротивление при низких температурах оказываются на два порядка больше, чем для продольных фононов. В результате при низких температурах $T \ll \theta_D$ вклады квазипоперечных мод в электросопротивление Au, Ag, Cu достигают 99.5, 97, 98%, соответственно. Причем, главную роль играет релаксация электронов на сдвиговых компонентах этих волн. Их вклад при температурах $T \ll \theta_D$ составляет 95, 91 и 95% для кристаллов Au, Ag и Cu, соответственно, а при $T = 1000$ К он уменьшается до 73, 44 и 66 %. Учет релаксации электронов на сдвиговых компонентах квазипоперечных фононов позволил количественно согласовать результаты расчета температурных зависимостей электросопротивления БМ с данными эксперимента в температурном интервале от 10 до 1000 К.

Диссертация написана хорошим языком. Все необходимые формулы, для понимания того, как производились расчеты, приведены. Отдельные технические детали

вынесены в приложение. Проведенные исследования описаны подробно, с обоснованием основных положений и аккуратным цитированием использованной литературы.

По содержанию диссертации есть следующие **замечания**:

1. Исследование влияния упругой анизотропии на электронный и фононный транспорт в кристаллах кубической симметрии, проведенное в диссертации, базируется на *акустическом* фононном спектре, получаемом в рамках модели анизотропного континуума. В таком подходе полностью отсутствуют оптические ветви фононного спектра. Конечно в качестве основных объектов исследования в диссертации выбраны кристаллы элементов с кубической решеткой, однако даже в Si, исследованном в гл. 2 и 3, кубическая решетка типа алмаза с двумя атомами на элементарную ячейку и значит 3 оптических ветви фононного спектра. Тем более оптические ветви спектра имеются в системах из 2, 3 элементов (гл. 3). К сожалению, в диссертации оптические фононы вообще не упоминаются и нет даже качественного анализа, как учет оптических ветвей фононного спектра может отразиться на результаты.

2. Конечно учет упругой анизотропии и взаимодействия электронов со сдвиговыми волнами (вклад медленных квазипоперечных фононов, которые ранее не учитывались), позволил на порядок увеличить результаты для электросопротивления кристаллов калия при низких температурах $T \ll \theta_D$, однако при $T \sim 10$ К они все еще оказываются на порядок меньше экспериментальных данных. В главе 4 диссертации указано, что такое отличие возможно связано с неучтенным вкладом от процессов электрон-фононного переброса. Конечно, хотелось бы иметь хотя бы качественную оценку, что учет этих процессов сможет исправить такое большое отличие.

Оформление диссертационной работы в целом проведено на высоком уровне, но есть ряд технических замечаний:

3. Некоторые буквы в формулах не определены или определены лишь через несколько страниц: массовая плотность ρ в (1.5) на стр. 18 определена лишь на стр. 20; углы θ, φ в (1.12) не определены; $k(\varepsilon)$ и $m(\varepsilon)$ в (4.7) не определены.

Имеются отдельные ошибки в ссылках на формулы и рисунки: ссылку на (1.14) после формулы (1.14) необходимо заменить на (1.13); в подписи к Рис. 1.9 (б,г,д) нужно заменить на (б,г,е); ссылку на Рис. 1.17б в строке 11 на стр. 48 необходимо заменить на Рис. 1.17в; ссылку на (3.1) на третьей строке стр. 62 нужно заменить на (2.1); В подписи к Рис. 3.4 должно быть – в плоскости грани куба (а,в,д), в диагональной плоскости (б,г,е); ссылку на Рис. 3.13 на стр. 112 нужно заменить на Рис. 3.14; ссылку на Рис. 4.8 в седьмой строке с низу стр. 142 нужно заменить на Рис. 4.9.

4. Ряд рисунков, особенно на которых приведены результаты для физических величин, безусловно требуют использования цвета, иначе очень сложно разобрать кривые, отвечающие разным вкладам (Рис. 4.14, 5.3, 5.8, 5.9, 5.14, 6.8).

Сделанные замечания во многом носят характер пожеланий для дальнейшей работы или являются техническими и не снижают общей высокой оценки диссертации.

Заключение

В целом, диссертация выполнена на высоком научном уровне и представляет собой цельное и законченное научное исследование. Основные результаты диссертации

доложены на международных конференциях и опубликованы в 24 статьях в ведущих российских и международных научных журналах и трех монографиях. Диссертационная работа соответствует пункту 1 Паспорта специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния. Автореферат правильно отражает содержание диссертации. Полученные результаты соответствуют поставленной цели и задачам.

Считаю, что диссертационная работа И.И. Кулеева «Фокусировка фононов, электронный и фононный транспорт в упруго анизотропных металлических и диэлектрических кристаллах и наноструктурах на их основе» соответствует всем требованиям «Положения о присуждении ученых степеней» установленным постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 №842 (в ред. От 11.09.2021) для диссертаций на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния, а ее автор, Кулеев Иван Игоревич, безусловно заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук.

Официальный оппонент

доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник,
заведующий лабораторией теоретической физики
Института электрофизики УрО РАН

Э.З. Кучинский

17 сентября 2025 г.

Почтовый адрес: 620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 106

Тел.: (343)2678823

E-mail: kuchinsk@iep.uran.ru

Подпись Э.З. Кучинского  заверяю
Зам. директора по НР
ИЭФ УрО РАН

Кайгородов А.С.

С отзывом ознакомлен 18.09.2025
Кулеев И.И.

Сведения об официальном оппоненте

ФИО: Кучинский Эдуард Зямович

Ученая степень, звание: доктор физико-математических наук, специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Полное наименование организации: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук

Должность: ведущий научный сотрудник, заведующий лаборатории теоретической физики

Почтовый адрес: 620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 106

Тел.: (343)2678823

E-mail: kuchinsk@iep.uran.ru

Публикации в сфере исследований, которым посвящена диссертация:

1. Э.З. Кучинский, Н.А. Кулеева, М.В. Садовский Термоздс и эффект Холла в коррелированных металлах и допированных Мотт - Хаббардовских диэлектриках: DMFT приближение. ЖЭТФ т. 164, вып. 6 (12), стр. 1056–1069 (2023)
2. Э.З. Кучинский, Н.А. Кулеева, М.В. Садовский, Д.И. Хомский Эффект Холла в легированном мотт - хаббардовском диэлектрике ЖЭТФ т. 163, вып. 3, стр. 417–427 (2023)
3. Э.З. Кучинский, Н.А. Кулеева, Д.И. Хомский, М.В. Садовский Эффект Холла в легированном моттовском диэлектрике: DMFT-приближение Письма в ЖЭТФ 115, №7, 444-447 (2022)
4. Кучинский Э.З., Кулеева Н.А. Электрон-фононная перенормировка массы в металле за пределами адиабатического приближения. ЖЭТФ 160, №3 (9), 434–442 (2021)
5. Kuchinskii E.Z., Sadovskii M.V. DMFT+ Σ approach to disordered Hubbard model ЖЭТФ т. 149, вып.3, 589-605 (2016)
6. E.Z.Kuchinskii, N.A. Kuleeva, M.V. Sadovskii Attractive Hubbard model Within the Generalized DMFT: Normal State Properties, Disorder Effects and Superconductivity Journal of Superconductivity and Novel Magnetism v. 29, 1097- 1103 (2016)
7. Э.З.Кучинский, И.А.Некрасов, М.В.Садовский Обобщенная теория динамического среднего поля в физике сильно коррелированных систем. УФН 182, №4, 345–378 (2012)
8. E.Z.Kuchinskii, M.V.Sadovskii, I.A.Nekrasov Interplay of electron-phonon interaction and strong correlations: DMFT+Sigma approach. J.Phys. Chem. Solids 72, №5, 366-370 (2011)
9. E.Z.Kuchinskii, I.A.Nekrasov, M.V.Sadovskii Interplay of electron-phonon interaction and strong correlations: DMFT+ Σ study. Phys Rev B 80, 115124 (1-5) (2009)
10. E.Z.Kuchinskii, I.A.Nekrasov, M.V.Sadovskii Pseudogaps in Strongly Correlated Metals: Optical Conductivity within the Generalized Dynamical Mean-Field Theory Approach Phys. Rev. B, 75, 115102 (2007)

Зам. директора по НР
ИЭФ УрО РАН

Кайгородов А.С.