

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по науке ФГАОУ ВО
«Уральский федеральный университет
имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

А.В. Германенко
«28» августа 2025

ОТЗЫВ

ведущей организации - Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» - 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

Актуальность темы диссертации

Диссертация направлена на решение одной из фундаментальных проблем физики твердого тела - исследование физических процессов, определяющих электронный и фононный транспорт в неравновесных электрон-фононных системах. Важным аспектом этой проблемы является изучение влияния анизотропии упругой энергии и фокусировки фононов на фононный транспорт и теплопроводность в объёмных образцах и наноструктурах, а также на процессы электрон-фононной релаксации, электросопротивление и термоэдс в металлах и наноструктурах на их основе. Проанализирована также роль квазипоперечных фононов и сдвиговых волн в электросопротивлении и термоэдс щелочных и благородных металлах.

Ранее при исследовании электронного и фононного транспорта в металлах и наноструктурах на их основе, для фононов использовалась модель изотропной среды. В этой модели предполагалось: спектр фононов изотропный, направления групповой скорости и волнового вектора фононов совпадают, эффект фокусировки отсутствует; все колебательные моды являются чистыми модами. Поэтому только продольные фононы могут взаимодействовать с электронами через деформационный потенциал и участвовать в электрон-фононной релаксации. Однако дальнейшие исследования показали, что в упруго анизотропных кристаллах спектр фононов является анизотропным, групповая скорость и волновой вектор фононов неколлинеарны. Это приводит к фокусировке фононов и, соответственно, к анизотропии фононного и электронного транспорта. Также упругая

анизотропия приводит к отклонению векторов поляризации фононов от направлений волнового вектора (для продольных фононов) и перпендикулярных ему направлений (для поперечных фононов). Таким образом, в рамках стандартной теории деформационного потенциала квазипоперечные фононы взаимодействуют с электронами проводимости. Диссертантом показано, что основной вклад в термоэдс и электросопротивление щелочных и благородных металлов вносят поперечные фононы. Поэтому актуальность диссертационной работы И.И. Кулеева не вызывает сомнения как с фундаментальной, так и с практической точки зрения.

Структура и основное содержание работы

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 проведен детальный анализ динамических характеристик упругих волн в кубических кристаллах. Показано, что все кристаллы кубической симметрии в соответствии со знаком безразмерного параметра анизотропии $k-1$ ($k = (c_{12} + c_{44}) / (c_{11} - c_{44})$, где c_{ij} - модули упругости кубического кристалла), который входит в уравнения Кристоффеля, могут быть разделены на два типа: кристаллы с положительной $k-1 > 0$ (тип I) и отрицательной $k-1 < 0$ (тип II) анизотропией упругих свойств. В кристаллах одного типа направления фокусировки и дефокусировки фононов совпадают, тогда как в кристаллах различного типа они противоположны: направления фокусировки в кристаллах первого типа становятся направлениями дефокусировки в кристаллах второго типа. Показано, что в упруго анизотропных кристаллах максимальные значения плотности фононных состояний (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.

Во второй главе исследовано влияние фокусировки фононов на температурные зависимости теплопроводности монокристаллических образцов и наноструктур. Решена задача о кнудсеновском течении фононного газа в образцах конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечением. Использование полученных решений позволило адекватно описать экспериментальные данные по теплопроводности кристаллов кремния и фторида кальция с квадратным и прямоугольным сечениями без использования подгоночных параметров. Проанализированы зависимости теплопроводности этих кристаллов от направлений градиента температуры для образцов с квадратным сечением и от ориентаций боковых граней образца в образцах с прямоугольным сечением. Рассчитаны оба эффекта МакКарди в теплопроводности кристаллов Si и CaF₂ с различным типом анизотропии упругой энергии. Показано, что первый эффект МакКарди в образцах с квадратным сечением обусловлен фокусировкой медленной t_2 -моды в кристаллах обоих типов. Причем в кристаллах первого типа с $k-1 > 0$ максимум теплопроводности достигается в направлениях [001], тогда как в кристаллах второго типа с $k-1 < 0$ - в направлении [111], соответствующем минимуму теплопроводности в кристаллах первого типа. Второй эффект МакКарди обусловлен

фокусировкой быстрой поперечной моды в кристаллах обоих типов, приводящей к изменению распределения теплового потока по поперечному сечению образца.

В третьей главе рассмотрены особенности фононного транспорта в полупроводниковых и диэлектрических наноструктурах с различным типом упругой анизотропии, также в материалах, используемых для создания спинтронных наноструктур: в металлических сверхрешетках Fe/Cr, Co/Cu; наногетероструктурах Fe/MgO/Fe; гибридных гетероструктурах Fe/GaAs и Fe/InSb. Показано, что максимумы теплопроводности в спинтронных материалах обеспечиваются медленной квазипоперечной модой и достигаются в направлениях типа [100]. Анализ температурных зависимостей теплопроводности гетероструктур GaAs/AlGaAs показал, что в интервале температур от 0.2 до 0.8 К в гетероструктурах GaAs доминирует граничное диффузное рассеяние на границах и реализуется случай кнудсеновского течения фононного газа. Показано, что 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 с учетом анизотропии упругих свойств и взаимодействием электронов со сдвиговыми волнами. Константа взаимодействия со сдвиговыми волнами определялась из согласования рассчитанных зависимостей теплопроводности и термоэдс с экспериментальными данными, а константа деформационного потенциала определялась стандартным образом из энергии Ферми. 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 электросопротивление кристаллов калия, которые ранее не учитывались, при температурах, гораздо меньших температуры Дебая $T \ll \theta_D$, на порядок величины превышают вклад продольных фононов. Определено максимальное значение термоэдс увлечения равное 8.33 нВ/К⁴ для кристаллов калия.

В пятой главе исследовано влияние фокусировки фононов на термоэдс увлечения в монокристаллических наноструктурах калия при низких температурах. Показано, что в наноструктурах калия с поперечными размерами $D < 5 \cdot 10^{-6}$ см реализуется режим кнудсеновского течения фононного газа, и рассеяние фононов на границах образцов преобладает над объёмными механизмами рассеяния, главным из которых является электрон-фононная релаксация. 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 фокусировки фононов на электронный транспорт в монокристаллах благородных металлов (БМ). В ней получены, по нашему мнению, наиболее интересные результаты. Диссертант рассчитал транспортные времена релаксации электронов на фононах различных поляризации и определил вклады различных мод в электросопротивление упруго анизотропного металла. Было 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 оказывается на два порядка больше, чем для продольных фононов. Причем основную роль в релаксации электронов играет рассеяние на поперечных компонентах квазипоперечных фононов (сдвиговых волнах). Отметим, что взаимодействие электронов с продольными компонентами обусловлено деформациями сжатия и растяжения и описывается потенциальным полем, тогда как рассеяние электронов на сдвиговых волнах – вихревым полем. Эти поля имеют разную природу и поэтому не интерферируют. Вследствие этого они дают аддитивные вклады в высокотемпературной области и могут быть выделены. С другой стороны, Займан показал, что в области высоких температур $T \gg \theta_D$, где электросопротивление следует линейной зависимости от температуры, квантование энергии колебаний решетки не играет роли. В этом случае электросопротивление не зависит от деталей спектра фононов, а пропорционально среднему квадрату амплитуды тепловых колебаний атома, и, соответственно, температуре. В результате при низких температурах $T \ll \theta_D$ вклад квазипоперечных мод в электросопротивление Au, Ag, Cu он достиг 99.5, 97, 98%, соответственно. Причем, главную роль играет релаксация электронов на сдвиговых волнах. 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.

В заключении перечислены основные выводы, полученные в диссертационной работе. Автореферат диссертации правильно отражает ее основные положения.

Научная новизна результатов диссертационной работы. В диссертационной работе развито новое направление исследований влияния анизотропии упругих свойств на фокусировку фононов, электронный и фононный транспорт в металлических и диэлектрических кристаллах и наноструктурах на их основе.

Достоверность полученных в диссертации результатов определяется использованием хорошо апробированного метода расчета электронного и фононного транспорта – метода кинетических уравнений для неравновесных функций распределения квазичастиц.

Научная и практическая значимость работы определяются тем, что полученные в диссертации результаты существенно расширяют и углубляют представления современной теории электронного и фононного транспорта в металлических и диэлектрических кристаллах и наноструктурах на их основе. Показано, что в соответствии со знаком параметра анизотропии кубические кристаллы могут быть разделены на два типа: кристаллы с положительной и отрицательной анизотропией упругой энергии. Решение задачи о кнудсеновском течении фононного газа упруго анизотропных монокристаллических образцов конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечением с учетом фокусировки

фононов позволило адекватно описать большую совокупность экспериментальных данных по теплопроводности упруго анизотропных кристаллов и наноструктур на их основе. Причем в кристаллах первого типа максимумы теплопроводности достигаются в направлениях, в которых для кристаллов второго типа имеет место минимум теплопроводности.

Следует отметить практическую ценность результатов, относящихся к исследованию влияния упругой анизотропии и фокусировки фононов на электронный транспорт в благородных металлах. Показано, что при температурах гораздо меньше температуры Дебая $T \ll \theta_D$ в электросопротивлении благородных металлах доминирует вклад сдвиговых волн, который ранее не учитывался. Для кристаллов Au, Ag и Cu он составляет 95, 91 и 95%, соответственно. Учет релаксации электронов на сдвиговых компонентах квазипоперечных фононов позволил количественно согласовать результаты расчета температурных зависимостей электросопротивления с данными эксперимента в температурном интервале от 10 до 1000 К.

Замечания по диссертационной работе

1. В третьей главе диссертации рассчитаны температурные зависимости теплопроводности гетероструктур GaAs/AlGaAs. Получено хорошее согласие с экспериментальными данными работы Флетчера в интервале температур от 0.2 до 1 К. В данной статье приводятся также экспериментальные данные по температурным зависимостям термоэдс увлечения. В этом температурном интервале эксперимент, во-первых, дает зависимость T^4 , а во-вторых, обнаружена анизотропия термоэдс увлечения. Поэтому возникает вопрос: проводились ли расчеты температурных зависимостей термоэдс увлечения в гетероструктурах?

2. При обсуждении электросопротивления и термоэдс щелочных и благородных металлов следовало бы более детально обсудить пределы применимости развитой теории и роль процессов электрон-фононного переброса, так как учет релаксации электронов на сдвиговых компонентах квазипоперечных фононов позволил достаточно хорошо согласовать результаты расчета температурных зависимостей электросопротивления с данными эксперимента в температурном интервале от 10 до 1000 К, но при более низких температурах наблюдается значительное отклонение от закона Блоха-Грюнайзена. С другой стороны, процессы переброса приводят к появлению гигантского положительного пика в термоэдс увлечения в кристаллах рубидия и цезия, тогда как теория Блоха-Грюнайзена дает отрицательный знак термоэдс и зависимость типа $\alpha_{\text{drag}} \sim BT^3$. Поэтому исследование роли процессов электрон-фононного переброса в упруго анизотропных металлах представляют интересную задачу.

Однако, эти замечания имеют характер пожеланий к дальнейшему развитию направлений исследований и не снижают высокой оценки диссертации.

Заключение

Представленный материал является актуальным, цельным и законченным научным исследованием. Полученные результаты являются крупным и важным вкладом в физику конденсированного состояния, в значительной своей части носят пионерский характер и представляют большой интерес для широкого круга исследователей в этой области. Основные положения и выводы диссертационной работы хорошо аргументированы. Результаты работы своевременно опубликованы в ведущих журналах, в трех монографиях, а также доложены на

представительных конференциях и широко известны специалистам. Выполненные работы были поддержаны рядом грантов. Это говорит о детальной экспертной оценке диссертационной работы. Автореферат диссертации полно и правильно отражает ее основные положения.

Таким образом диссертация И.И. Кулеева «Фокусировка фононов, электронный и фононный транспорт в упруго анизотропных металлических и диэлектрических кристаллах и наноструктурах на их основе» соответствует всем критериям, предъявляемым к диссертациям на соискания ученой степени доктора физико-математических наук, установленным в «Положения о присуждении ученых степеней» постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 №842 (с последующими изменениями), а ее автор, Кулеев Иван Игоревич, безусловно заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Диссертационная работа И.И. Кулеева, автореферат и отзыв ведущей организации обсуждены и утверждены на заседании кафедры физики конденсированного состояния и наноразмерных систем Института естественных наук и математики Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» 28 августа 2025, протокол № 5.

Доктор физико-математических наук, профессор,
профессор кафедры физики конденсированного состояния
и наноразмерных систем,
Институт естественных наук и математики,
ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет
имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

Бабушкин Алексей Николаевич

Дата: 28 августа 2025 г.

620062, Екатеринбург, ул. Мира, 19

Тел.: +7 (343) 3899564

e-mail: alexey.babushkin@urfu.ru

Подпись д.ф.-м.н., профессора ФГАОУ ВО «Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н.Ельцина» Бабушкина А.Н. заверяю

ЗНАЮЩИЙ СПЕЦИАЛИСТ
ЧЛЕН СОВЕТА УРФУ
ДРЯШОВА Н.Н.

С отзывом ознакомлен 29 августа 2025

/ Кулеев И.И. /

Сведения о ведущей организации

по диссертации Кулеева Ивана Игоревича «Фокусировка фононов, электронный и фононный транспорт в упруго анизотропных и диэлектрических кристаллах и наноструктурах на их основе», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Полное наименование организации в соответствии с уставом	Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»
Сокращенное наименование организации в соответствии с уставом	ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» или УрФУ
Ведомственная принадлежность	Министерство науки и высшего образования
Почтовый индекс, адрес организации	620062, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19
Веб-сайт	https://urfu.ru
Телефон	+7 (343) 375-45-07, 375-46-09, 375-97-78 (факс)
Адрес электронной почты	rector@urfu.ru

Список основных публикаций сотрудников организации по теме диссертации за последние 5 лет (не более 15 публикаций)	
1.	Чернышев В.А. Структура и динамика решетки редкоземельных станнатов R ₂ Sn ₂ O ₇ (R=La-Lu): ab initio расчет // ФТТ. – 2021. – Т. 63., № 7. – С. 952-965. DOI: 10.21883/FTT.2021.07.51049.027
2.	Чернышев В. А., Глухов К. И., Агзамова П. А. Фононный спектр и упругие свойства Y ₂ Sn ₂ O ₇ // Оптика и спектроскопия. – 2021. – Т.198. – №. 8. – С.1027-1036. DOI: 710.21883/OS.2021.08.51198.2056-21
3.	288. E.L. Rumyantsev, P.E. Kunavin, A.V. Germanenko, Zero energy states in graphene in Aharonov–Bohm magnetic dots via Wirtinger calculus. Physica E. – 2021. –V. 134. – P.114851. DOI: 10.1016/j.physe.2021.114851
4.	Чернышев В.А., Петров, В.П. Фононный спектр La ₂ Ge ₂ O ₇ : ab initio расчет // Физика твердого тела. – 2022. – Т. 64. – № 8. – С. 1052-1065. DOI: 10.21883/FTT.2022.08.52707.301
5.	Chernyshev V.A., Glukhov K.I., Agzamova P.A. Structure and Lattice Dynamics of R ₂ Sn ₂ O ₇ and R ₂ Zr ₂ O ₇ (R = La–Lu) Crystals: Ab Initio Calculation // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. – 2022. – V. 35. – No 8. – P. 2231-2239. DOI: 10.1007/s10948-022-06316-3
6.	M. V. Grigoriev, A. V. Ruseikina, V. A. Chernyshev, A. S. Oreshonkov, A. A. Garmonov, M. S. Molokeev, R. J. C. Locke, A. V. Elyshev, T. Schleid. Single crystals of EuScCuSe ₃ : synthesis, experimental and DFT investigations // Materials. – 2023. – V. 16. – № 4. – P. 1555. DOI: 10.3390/ma16041555
7.	V. A. Vazhenin, M. Yu. Artyomov, G. S. Shakurov, R. B. Zaripov, K. A. Subbotin, A. V. Shestakov. EPR detection of Cr ⁴⁺ centers in yttrium orthosilicate Y ₂ SiO ₅ / A. P. Potapov, // Optical Materials. – 2023. – V. 143. – P. 114149. DOI: 10.1016/j.optmat.2023.114149
8.	Moskvin A. Jahn-Teller magnets // Magnetochemistry. – 2023. – V. 9. – No. 224. DOI: 10.3390/magnetochemistry9110224
9.	Соколов В. И., Груздев Н. Б., Меньшенин В. В., Киряков А. Н., Зацепин А. Ф., Вазенин В. А., Емельченко Г. А. Проявление локальных колебаний в спектрах фотолюминесценции ZnO: Fe ³⁺ // Оптика и спектроскопия. – 2023. – Т. 131. – № 4. – С. 514-517. DOI: 10.21883/OS.2023.04.55556.52-22

10.	M. V. Grigoriev, A. V. Ruseikina, M. S. Molokeev, V. A. Chernyshev, A. S. Aleksandrovsky, A. S. Krylov, S. N. Krylova, N. P. Shestakov, D. A. Velikanov, A. A. Garmonov, A. V. Matigorov, E. A. Ostapchuk, Elucidating elusive quaternary selenide EuCeCuSe_3 : Synthesis, crystal structure, properties and theoretical studies // Journal of Rare Earths. – 2024. – V.42. – P. 163-171. DOI: 10.1016/j.jre.2022.11.004
11.	Г. М. Миньков, О. Э. Рут, А.А. Шерстобитов, А. В. Германенко, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов. Магнитотранспорт в квантовых ямах HgTe с двумя полевыми электродами. Физика и техника полупроводников. – 2024. – Т. 58. – С. 434-442. DOI: 10.61011/FTP.2024.08.59202.7175
12.	A. V. Ruseikina, M. V. Grigoriev, V. A. Chernyshev, D. A. Safin. Synthesis, structure and properties of the novel quaternary selenide BaSmCuSe_3 : Experimental and theoretical insights // Inorganic Chemistry Communications. – 2024. – V. 160. – No. 111909. DOI: 10.1016/j.inoche.2023.111909
13.	Климин С.А., Молчанова А.Д., Чернышев В.А., Денисов В.Н., Новикова Н.Н., Яковлев В.А. Спектроскопическое исследование мультиферроика LiCoPO_4 : магнитоструктурный фазовый переход. – 2025. – Письма ЖЭТФ. – Т. 121. – № 3-4. – С. 202-208. DOI: 10.31857/S0370274X25020051

Проректор по науке

А.В. Германенко