

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Корепанова Виталия Игоревича **«Размерные эффекты и количественный анализ спектров комбинационного рассеяния наночастиц и сред с локальным порядком»**,

представленную на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук

по специальности 05.27.01 «Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах»

Открытый уже без малого век назад эффект комбинационного (неупругого) рассеяния света (КРС, или в англоязычной литературе Raman scattering) уже более полувека является не просто ярким и интересным физическим явлением, а стал основой замечательной методики исследования материалов. Связано это с изобретением и совершенствованием мощных компактных когерентных источников света (лазеров), технологии изготовления дифракционных решёток, оптических фильтров, и высокочувствительных матричных детекторов света. Но, особенно в последнее время, прогресс в данной методике связан не только с совершенствованием техники, но и с развитием подходов для анализа спектров КРС с использованием численных расчётов. Особенно важно развитие таких подходов для анализа современных наноструктур, нанокompозитов, и для работы с большим массивом данных, например при картировании образцов. Без таких подходов невозможен анализ новых материалов, которые будут определять прогресс в наноэлектронике (особенно в пост-кремниевую эпоху). Поэтому выбранная тема диссертации является безусловно актуальной.

Диссертационная работа Корепанова Виталия Игоревича представляет собой цельное и достаточное по объёму исследование, с чётко сформулированными целями, задачами, научными положениями, и выводами. Содержание автореферата отражает содержание диссертации, основные результаты опубликованы в высокорейтинговых рецензируемых журналах, список работ автора по теме диссертации насчитывает 19 научных статей. Степень обоснованности научных положений и выводов, сформулированных в диссертации, определяется широким выбором исследуемых объектов – нанокристаллов алмазов и оксида цинка, углеродных нанокompозитов, стёкол и воды, а также сравнительным анализом данных КРС с данными, полученными другими методиками. Таким образом, автор показал необходимую квалификацию, полученные им данные являются достоверными.

Среди полученных в диссертации основных результатов стоит отметить следующее.

1) Решена научная проблема, имеющая важное значение для количественного анализа структуры (прежде всего размеров) нанокристаллов из спектров КРС. Для этого автор существенно улучшил известную модель локализации фононов (МЛФ). В отличие от использованных ранее в основном одномерных моделей с нефизическими подгоночными дисперсиями фононов, он использовал квантовомеханические расчёты дисперсии из первых принципов (*ab initio*). Так как точность *ab initio* расчётов пока недостаточна, автор приводил их данные в соответствие с хорошо известными из экспериментов частотами фононов в центре зоны Бриллюэна (ЗБ). Также безусловной новизной используемого им подхода являлось не только учёт анизотропии дисперсии (трёхмерная МЛФ), но и учёт анизотропии сечений КРС. Модель протестирована на широком классе объектов, включая не только нанокристаллы и стёкла, но и жидкости (воду).

2) Автором предложена аналитическая функция, позволяющая описывать асимметричные формы линий, часто наблюдающиеся в спектрах КРС низкоразмерных систем. Универсальность предложенной функции была проверена на ряде экспериментальных спектров с различной природой асимметричного уширения линий. Этот результат важен для практического применения – особенно для анализа большого массива спектров, который необходим в случае картирования.

3) Предложен и реализован алгоритм для разделения сигнала КРС и фона от фотолюминесценции, который создаёт большие методические сложности для анализа спектров КРС от флуоресцирующих объектов (прежде всего это органические молекулы и нанокомпозиты на основе углерода). Практическое значение этого результата заключается в том, что у исследователей не всегда есть возможность выбрать источник возбуждения, для которого фотолюминесцентный фон незначителен, таким образом неизбежно приходится использовать численные алгоритмы для анализа таких спектров.

4) Предложен простой способ оценки степени ориентированности кристаллитов для текстурированных плёнок материалов с гексагональной решёткой (на примере нитрида алюминия).

5) Установлены пределы применимости МЛФ для различных объектов. Из сравнительного анализа данных КРС и электронной микроскопии показано, что разработанную автором улучшенную МЛФ можно использовать для количественного анализа размеров нанокристаллов. Показано, что в случае нанокристаллов из материалов, дисперсия оптических фононов в центре ЗБ которых недостаточно выражена, для анализа

размеров нужно использовать МЛФ для акустических фононных ветвей.

Из вышеперечисленного следует достоверность и новизна полученных в диссертации результатов.

Вместе с тем к работе имеются следующие замечания:

1. Утверждается, что ступенеобразная форма «оггибающей» функции наиболее адекватна в МЛФ. Однако известно, что Фурье-спектр функций с резкой границей содержит высокие гармоники, что должно отразиться в появлении низкочастотных особенностей (дополнительных пиков) в спектре КРС, чего не наблюдается в эксперименте. Вероятно, такая форма «оггибающей» адекватна для нанокристаллов со свободной поверхностью (нанопорошков), но не вполне адекватна для нанокристаллов, находящихся, например, в аморфной матрице. Для общности выводов в работе не хватает обсуждения эффектов влияния окружения нанокристаллов на их спектры КРС.
2. В части работы, посвящённой разделению сигнала КРС и фона от фотолюминесценции, было бы целесообразно провести сравнительный анализ математических и аппаратных методов решения данной проблемы. Известно, что существует методика сдвига линии возбуждения КРС «shifted-excitation Raman difference spectroscopy (SERDS)», например [Shreve AP, Cherepy NJ and Mathies RA 1992 Effective rejection of fluorescence interference in Raman spectroscopy using a shifted excitation difference technique Appl. Spectrosc. 46 707-711 и United States Patent US008570507 B1]. Она основана на температурной модуляции частоты возбуждающего лазера, при этом сигнал КРС «привязан» к частоте возбуждения, а сигнал фотолюминесценции нет. Конечно, подход автора не требует специальной дорогостоящей техники, это его преимущество, но хотелось бы сравнить возможности обоих подходов, особенно в случае, когда отношение сигнала КРС к сигналу фотолюминесценции слабое.
3. Автор утверждает, что МЛФ неприменима в случае сильнолегированных материалов. Такое утверждение требует аргументации. Известно, что в случае сильнолегированных нанокристаллических плёнок алмаза и кремния р-типа, одновременно могут проявляться фактор локализации фононов, и фактор резонанса Фано. В этом случае, можно просто заменить кривую Лоренца на кривую контура Фано в формуле подынтегрального выражения в МЛФ. Тем более что автор на странице 71 сообщает, что «эти два фактора могут проявляться одновременно».
4. Хотя диссертация в целом написана грамотно, имеются ряд неточностей и использование жаргона. Например, имеется ввиду конечно «квази-импульс», там, где автор говорит об импульсе. На мой взгляд неточно говорить о «разрыве дисперсии в

центре ЗБ», так как это просто различные ветви дисперсии – например продольные и поперечные оптические фононы. Более грамотно говорить «зарегистрировать спектр», а не «снять спектр» и т.д.

Сделанные замечания не влияют на обоснованность положений, достоверность выводов и не умаляют общего положительного впечатления о работе, а также не снижают её научной и практической значимости. Основные результаты, полученные в работе, апробированы - представлены на Российских и международных симпозиумах и конференциях.

Заключение

Считаю, что диссертационная работа «Размерные эффекты и количественный анализ спектров комбинационного рассеяния наночастиц и сред с локальным порядком» по своей актуальности, научному уровню, объему решаемых задач и завершенности исследований отвечает всем критериям Положения о присуждении ученых степеней, предъявляемым к докторским диссертациям (в частности пункта 9 вышеупомянутого Положения), а её автор, Корепанов Виталий Игоревич, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 05.27.01 «Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и нанoeлектроника, приборы на квантовых эффектах».

Официальный оппонент,

старший научный сотрудник, доктор физико-математических наук, доцент


В.А. Володин

Подпись Володина Владимира Алексеевича заверяю,
Ученый секретарь ИФП СО РАН, к.ф.-м.н.


С.А. Аржанникова

«3» марта 2021 г.

Володин Владимир Алексеевич, доктор физико-математических наук (специальность «Физика полупроводников» - 01.04.10), доцент, старший научный сотрудник Лаборатории неравновесных полупроводниковых систем.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отд. РАН (ИФП СО РАН). Россия, г. Новосибирск, пр. ак. Лаврентьева, 13, 630090, +7(383)330-90-55, latyshev@isp.nsc.ru, <https://www.isp.nsc.ru/>