

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертацию Дюрягиной Натальи Сергеевны «Электрофизические свойства нанокomпозиционных материалов при радиационном взаимодействии», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Актуальность темы. Наноструктурные и нанокomпозиционные конденсированные материалы широко используются в фундаментальных и прикладных исследованиях. В частности, нанокomпозиционные материалы могут быть использованы в радиационной дозиметрии. Поскольку нанокomпозиционный материал представляет собой включения наночастиц с размером менее 100 нм в матрицу исходного материала, *важно и актуально* теоретически и экспериментально исследовать зависимость электрофизических свойств (энергетического спектра, радиационной проводимости, механизмов поглощения электромагнитного излучения и термостимулированной люминесценции) нанокomпозита от размера и концентрации наночастиц. Представленная диссертационная работа является, по моему мнению, первой научной работой, целью которой является разработка комплексной теоретической модели для описания указанных выше электрофизических свойств нанокomпозита при воздействии ионизирующего излучения и проведение в рамках ее исследование зависимости этих свойств от размера и концентрации наночастиц.

Выше сказанное также позволяет сделать вывод о соответствии темы диссертации Дюрягиной Н.С. паспорту специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Диссертация Дюрягиной Н.С., объемом 117 страниц текста, состоит из введения; четырех глав, первая из которых - обзорная; заключения; списка работ по теме диссертации и публикаций автора в сборниках тезисов и докладов; списка литературы из 110 наименований. Ознакомление с диссертацией позволяет утверждать, что сформулированные Дюрягиной Н.С. положения, выносимые на защиту, раскрыты и обоснованы в 3-х из 4-х глав диссертации. Ниже, по ходу анализа их основного содержания, мы выделяем наиболее значимые, на наш взгляд, результаты диссертанта.

Во введении обоснована *актуальность* темы диссертационной работы; сформулированы *цели и задачи*; показаны *научная новизна, достоверность полученных результатов, их научная и практическая значимость*, а также приведены *научные положения*, выносимые автором на защиту, и информация о *личном вкладе диссертанта и апробации* результатов работы.

Первая глава - обзорная. В разделе 1.1 на основе анализа литературных источников сделан обзор функциональных свойств нанокomпозиционных материалов, включая радиационные свойства диэлектриков и полупроводников (подраздел 1.1.1); электрофизические свойства нанокomпозиционных материалов на основе полимеров (подраздел 1.1.2); электрофизические свойства нанокomпозиционных материалов на основе оксида алюминия (подраздел 1.1.3). В разделе 1.2 рассмотрены используемые методы теоретического описания электрофизических свойств нанокomпозиционных материалов. В разделе 1.3 на основе проделанного литературного обзора формулируются требования, которым должны удовлетворять теоретические модели нанокomпозиционных материалов, наиболее адекватно описывающие их электрофизические свойства при радиационном воздействии.

Глава 2 посвящена разработке предлагаемого диссертантом метода теоретического описания электрофизических свойств нанокomпозиционных материалов. В разделе 2.1 определяет энергетический спектр локализованных состояний, причем в подразделе 2.1.1

рассматриваются собственные локализованные состояния диэлектрических и полупроводниковых материалов, а в подразделе 2.1.2 – локализованные состояния, обусловленные включением в матрицу наночастиц, собственно, примесные состояния. В первом подразделе диссертант вводит определение основных характеристик локализованных состояний: коэффициент захвата и время термического освобождения захваченных носителей заряда, а также дает на основе литературных данных их значения для двух типов материалов: полимера с дырочной проводимостью и оксида алюминия – материала с электронной проводимостью. Для нахождения примесных локализованных состояний, обусловленных включением сферической наночастицы, автор предложила описание, согласно которому наночастица описывается потенциальной ямы, глубина которой определяется разницей работ выхода из наночастицы и матрицы. Вне наночастицы яма описывается кулоновским потенциалом с учетом экранирования заряда наночастицы. Существенным достоинством предложенного потенциала – его непрерывность при произвольном не равном нулю радиусе экранирования. Автор решила уравнение Шредингера в сферической системе координат с этим потенциалом и, тем самым, нашла энергетический спектр локализованных состояний, определяемых наночастицей. Ею также показано, что «радиус экранирования определяется из условия, что «число энергетических уровней $\langle \dots \rangle$ должно быть не меньше, чем число электронов, которое локализуется в $\langle \dots \rangle$ яме с учетом принципа Паули» (с. 40 диссертации). Данный результат, несомненно, обладает научной новизной. В предположении, что механизмы захвата и термического освобождения носителей заряда для собственных и примесных локализованных состояний одинаковы, автор оценила значения их характеристик, как для акцепторных, так и донорных включений. В разделе 2.2 обсуждаются способы описания генерации носителей заряда в нанокomпозиционном материале в результате воздействия ионизирующего излучения (подраздел 2.2.1) и в результате термоионизации (подраздел 2.2.2). В разделе 2.3 приведена система уравнений кинетики носителей заряда в нанокomпозиционном материале в предположении однородности ионизации по объему материала, несущественности эффектов заряжения материала и в пренебрежении дрейфом носителей заряда (система уравнений (2.13)-(2.16)). В разделе (2.4) обсуждается принятое диссертации описание термостимулированной люминесценции нанокomпозиционного материала, поглощение излучения в нем, а также кинетическое уравнение переноса излучения через вещество. В разделе 2.5 описывается предложенный в диссертации метод решения системы уравнений Роуза-Фаулера, обобщенной автором на случай нанокomпозиционного материала. Существенным достоинством предлагаемого метода решения является использование приближенного аналитического решения для малого интервала Δt , выбираемого из условия минимума отклонения приближенного от точного решения.

Глава 3 посвящена верификации предложенной в Главе 2 модели. В разделе 3.1 показана применимость предложенной модели для расчета радиационной проводимости полиметилметакрилата вначале для полимера с двумя ловушками в энергетическом спектре локализованных состояний (подраздел 3.1.1, модель Ван-Линта). Убедительно продемонстрировано, что предложенная в диссертации модель с высокой точностью описывает двух ловушечную модель полимера. В подразделе 3.1.2 сравнением с известными из литературных источников данными также убедительно продемонстрирована применимость предложенной модели для расчета радиационной проводимости полимера с непрерывным спектром локализованных состояний. В подразделе 3.1.3 исследована устойчивость предложенного метода решения системы дифференциальных уравнений Роуза-Фаулера и установлены условия выбора оптимального с точки зрения устойчивости временного шага интегрирования. В разделах 3.3 показана применимость предложенной модели для расчета

коэффициента поглощения излучения в чистом полиметилметакрилате (раздел 3.2) и термостимулированной люминесценции чистого оксида алюминия (раздел 3.3).

В основной (по объему текста (~26%) и научных результатов) Главе 4 анализируются научные результаты исследования радиационной проводимости и термостимулированной люминесценции нанокпозиционных материалов. В важном разделе 4.1, носящем методический характер, рассматриваются использованные в работе методы формирования начального состояния нанокпозиционного материала. Их достоинством является достаточно полная аналогия теоретических методов формирования начального состояния экспериментальным методам. В разделе 4.2 исследована радиационная проводимость нанокпозиционного материала на основе полиметилметакрилата – нанокпозиции ПММА+CdS. В разделах 4.3 и 4.4 (в диссертации разделы имеют номера 4.2 и 4.3 (по-видимому, это описка)) исследуется радиационная проводимость (раздел 4.3) и термостимулированная люминесценция нанокпозиционного материала на основе оксида алюминия (раздел 4.4). Основные новые научные результаты данной главы: (1) Равновесная проводимость нанокпозиции определяется концентрацией полупроводниковых наночастиц; (2) Скорость релаксации облученного нанокпозиции к новому равновесному состоянию определяется долей мелких ($E_m \leq kT$) в энергетическом спектре; (3) Новое равновесное значение, устанавливающееся в результате релаксации, совпадает со старым в случае, когда число примесных ловушек превышает число собственных ловушек; (4) Чувствительность нанокпозиции к радиационному воздействию существенно увеличивается в случае, когда концентрация примесных ловушек не превышает концентрацию собственных ловушек; (5) Включение частиц SrO в матрицу из оксида алюминия приводит к формированию примесных ловушек. В случае, когда их концентрация на порядок меньше концентрации собственных ловушек оксида алюминия и предварительного прогрева нанокпозиции до 436 К увеличивается зависимость основного пика термостимулированной люминесценции от поглощенной энергии ионизирующего излучения.

В *Заключении* формулируются основные результаты диссертационной работы.

Автореферат включает необходимые сведения о диссертации Дюрягиной Н.С. и соответствует её содержанию. Сама диссертационная работа структурирована по правилам ВАК, содержит требуемые формальные разделы, в достаточной степени иллюстрирована и дает полное представление о проведенных исследованиях и их результатах. Все полученные автором научные результаты обладают несомненной научной новизной и практической ценностью. Они могут быть использованы при анализе результатов экспериментов по изучению взаимодействия интенсивного электромагнитного излучения с наноструктурированным и нанокпозиционным веществом, проводимых в научных организациях Российской академии наук, Госкорпорации "Росатом", НИЦ "Курчатовский институт", а также использованы при подготовке специалистов в области радиационного материаловедения. Достоверность полученных результатов хорошо обоснована тщательностью выбора технических параметров проводимых компьютерных экспериментов, сравнением рассчитанных значений электрофизических характеристик нанокпозиционных материалов с известными из литературы экспериментальными данными и моделями других авторов. Следует также отметить, что личный вклад автора диссертации в проделанную работу не вызывает сомнения.

Как это типично для любой серьёзной научно-квалификационной работы, по диссертации Дюрягиной Н.С. можно сделать некоторые замечания:

1. Из описания модели Роуза-Фаулера (рис. 1.7 – модель запрещенной зоны и системы уравнений (1.7) неясно, как направлена ось z (поперек или вдоль валентной зоны образца)?
2. Уравнение (2.12), позволяющее найти «энергетический спектр разрешенных состояний, обусловленный включением заданного радиуса R_p » получено для непрерывного потенциала, определяемого формулой (2.2), справедливой лишь для случая ненулевого значения радиуса экранирования r_{sh} . Поэтому утверждение, что из уравнения (2.12) следует решение для сферически симметричной ямы с потенциалом, имеющим разрыв при $r=R_p$, неверно. По крайней мере, требуется исследовать поведение потенциала (2.2) при одновременном стремлении к нулю $(r-R_p)$ и r_{sh} . Поэтому для меня удивительно, что автор спокойно воспринимает факт получения радиуса экранирования для нанокompозита ПММА+CdS равным нулю (~ 0) (с. 42).
3. На рис. 3.6 приведено сравнение рассчитанного в рамках предложенной автором модели спектрального коэффициента поглощения чистого полиметилметакрилата в УФ-видимом диапазоне с экспериментом. Из этого рисунка видно, что начиная с длин волн, больших 400 нм, экспериментальный коэффициент поглощения не зависит, а расчетный уменьшается с ростом длины волны. Из приведенного в тексте пояснения, к сожалению, не понятно, почему модель автора не дает выход спектрального коэффициента поглощения на постоянное значение в диапазоне длин волн 400-600 нм.

Диссертация написана ясным, грамотным русским языком. Однако автор иногда допускает не достаточно корректные с физической точки зрения утверждения: так, на с. 26 использован термин «диаметр нанокристалла» (нанокристалл имеет сферическую форму? Тогда он не нанокристалл.); « E_F – темновой уровень Ферми» (почему не просто «уровень Ферми»?); на с. 33 написано «... E_z – дырочная ловушка, отсчитанная от потока валентной зоны.» (потолка валентной зоны?); на с. 87, 95, 100, 101 автор вместо общепринятого в учебниках по статистической физике и физической кинетике термина « процесс установления равновесия» использует «процесс становления равновесия».

Отмеченные замечания не снижают общего положительного впечатления о работе Дюрягиной Н.С. и имеют характер пожеланий более тщательно относиться к формулировке высказываемых утверждений. Я полагаю, что ответы на заданные вопросы не составят для нее проблемы и дадут специализированному совету Д 212.298.04 дополнительные основания для позитивной оценки диссертационной работы. Не вызывает также сомнения, что полученные Дюрягиной Н.С. результаты будут востребованы научным сообществом для дальнейших применений в национальных и мировых исследовательских центрах.

Общее заключение. Таким образом, Дюрягина Наталья Сергеевна представила к защите завершённую научно-исследовательскую квалификационную работу, в которой предложен и развит метод расчета электрофизических свойств нанокompозиционных материалов при радиационном воздействии, получены новые научные результаты, имеющие, по моему мнению, важное значение для развития научного направления "Радиационное материаловедение". На основании изложенного можно заключить, что диссертационная работа «Электрофизические свойства нанокompозиционных материалов при радиационном воздействии» удовлетворяет требованиям к кандидатским диссертациям, установленным в п. 9 «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г., а её автор, Дюрягина Наталья Сергеевна, несомненно, заслуживает присвоения искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

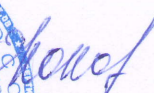
Отзыв составлен официальным оппонентом, главным научным сотрудником лаборатории нелинейной динамики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института электрофизики Уральского отделения Российской академии наук (ИЭФ УрО РАН), доктором физико-математических наук, старшим научным сотрудником Волковым Николаем Борисовичем.

Официальный оппонент,
д.ф.-м.н., 01.04.13 – электрофизика, старший научный сотрудник,
главный научный сотрудник
лаборатории нелинейной динамики ИЭФ УрО РАН
620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 106
8-(343)-267-86-60, nbv@iep.uran.ru



Н.Б. Волков

Ученый секретарь ИЭФ УрО РАН,
к.ф.-м.н.
620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 106
8-(343)- 267-88-18, ss@iep.uran.ru



Е.Е. Кокорина

16 апреля 2019 г.

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации,
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки,
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт электрофизики
Уральского отделения Российской академии наук (ИЭФ УрО РАН)
620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 106
8-(343)-267-87-96, ss@iep.uran.ru