

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Хомца Александра Леонидовича
«Кристаллическая структура и решёточная теплопроводность свободных
слоистых плёнок Si/Ge нанометровой толщины», представленной на
соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по
специальности 05.16.08 – нанотехнологии и наноматериалы (материалы для
электроники и фотоники)

Исследования термоэлектрических материалов направлено на создание эффективных термоэлектрических преобразователей, преобразующих тепловые потоки в электрические сигналы и имеющих перспективу использования в различных направлениях человеческой деятельности и промышленных применений. Основной проблемой, которая решается в настоящее время научным сообществом является повышение безразмерного коэффициента термоэлектрической добротности (ZT), который прямо пропорционален коэффициенту Зеебека и электропроводности, но обратно пропорционален теплопроводности материала. Эта задача является сложной и не имеет прямых путей решения, поскольку при увеличении электропроводности, наблюдается снижение коэффициента Зеебека и увеличение электронной теплопроводности, а решеточная теплопроводность зависит от процессов рассеяния в материалах и типа кристаллической решетки. Поиск путей снижения решеточной теплопроводности ведут либо за счет наноструктурирования термоэлектрических материалов, либо за счет создания различных сверхрешеток на основе типовых материалов, таких как, например, сплавы германий кремний. Последние имеют перспективу развития в практической плоскости, поскольку совпадают технологически с кремниевой планарной технологией и могут быть применены для создания пленочных термоэлектрических преобразователей. Но задача снижения теплопроводности для таких мультислойных системы или сверхрешеток не имеет своего окончательного решения.

В диссертационной работе А.Л. Хомца решается теоретически задача минимизации вкладов фононов, границ раздела и геометрических параметров на поперечную и продольную теплопроводность, что показывает ее актуальность, как для теории, так и для практической реализации будущих пленочных термоэлектрических преобразователей.

Целью диссертационной работы А.Л. Хомца явилось установление закономерностей влияния ориентации поверхности и интерфейсов, периода сверхрешётки, количества периодов и толщины диффузионно-перемешанных интерфейсов на поперечную и продольную решёточную теплопроводность при температуре 300 К для слоистых плёнок Si/Ge с ориентациями (001), (110) и (111) и толщинами до 100 нм с помощью метода неравновесной молекулярной динамики.

Автором отработаны методики расчетов, используемые для оптимизации моделируемых структур, моделирования решёточной

теплопроводности и расчёта фононных характеристик. Им далее поставлен ряд теоретических задач, которые полностью решены в диссертационной работе. К наиболее интересным результатам, обладающим новизной, следует отнести следующие заключения:

1) установлено, что при продольном теплопереносе ориентации слоистых плёнок Si/Ge с резкими интерфейсами оказывает более существенное влияние на теплопроводность по сравнению с поперечным теплопереносом;

2) выявлено, что увеличение количества периодов в слоистых плёнках Si/Ge с резкими интерфейсами приводит к пересечению зависимостей, обладающих наименьшей поперечной и продольной теплопроводностью;

3) установлено, что в слоистых плёнках Si/Ge с ориентациями (001), (110) и (111) с периодом сверхрешётки ~ 2 нм существует эффективная толщина диффузионно-перемешанных интерфейсов (4 монослоя), которая снижает ее поперечную теплопроводность ниже предела сплава $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$;

4) обнаружено, что слоистым плёнкам Si/Ge с диффузионно-перемешанными интерфейсами свойственна аномальная зависимость, выражающаяся в снижении продольной решёточной теплопроводности при увеличении толщины плёнки с ~ 2 до ~ 20 нм и более;

5) выявлено, что слоистым плёнкам Si/Si_{0,5}Ge_{0,5} с периодом сверхрешётки ~ 2 нм свойственна более низкая поперечная и продольная решёточная теплопроводность по сравнению со слоистыми плёнками Si/Ge с диффузионно-перемешанными интерфейсами.

Результаты диссертационной работы полностью опубликованы в 10 научных работах, включая 4 статьи в международных и российских журналах, рекомендованных ВАК РФ, 3 статьи в сборниках материалов научных конференции и трое тезисов докладов на белорусских конференциях.

В качестве замечаний следует отметить следующее:

1) В диссертационной работе рассматривались свободные слоистые плёнки Si/Ge и не рассматривались упругие напряжения в них. Учет таких напряжений как может повлиять на полученные результаты по теплопроводности?

2) В диссертационной работе рассчитывались поперечная и продольная теплопроводность слоистых систем и сверхрешеток Si/Ge, но сравнение с экспериментальными данными проведено только для поперечной теплопроводности. Однако в пленочных термоэлектрических преобразователях при продольном градиенте температур основной вклад вносит продольная теплопроводность. Есть ли экспериментальные данные по продольной теплопроводности для слоистых Si/Ge систем и соответствуют ли данные Ваших расчетов им?

3) Термин «протяженные» фононы выглядит слишком искусственным. Или это некий перевод с англоязычного термина?

4) Есть техническое замечание. В тексте автореферата на стр. 10 - 11 нет ссылки на Рис. 4(б).

Однако отмеченные недостатки не сказываются на высоком научном уровне выполненного теоретического исследования, которое содержит ряд новых и важных теоретических и методических результатов, которые имеют значение для их последующего использования при разработке тонкоплёночных термоэлектрических преобразователей энергии на основе кремния и германия с применением планарной кремниевой технологии.

На основании автореферата и списка публикаций соискателя считаю, что диссертационная работа «Кристаллическая структура и решёточная теплопроводность свободных слоистых плёнок Si/Ge нанометровой толщины» полностью удовлетворяет требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а ее автор Хомец А.Л. заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.16.08 – нанотехнологии и наноматериалы (материалы для электроники и фотоники) за представленные новые научные результаты.

Я, Галкин Николай Геннадьевич, выражаю согласие на размещение отзыва в открытом доступе на сайте учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники»

Главный научный сотрудник Института
автоматики и процессов управления ДВО РАН,
Заслуженный деятель науки РФ,
профессор по специальности
«физика конденсированного состояния»,
доктор физико-математических наук
Галкин Николай Геннадьевич



27.03. 2026 г.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт автоматки и процессов управления ДВО РАН
(690041, г. Владивосток, ул. Радио, 5)
Факс: 8(423)2310452
e-mail: galkin@iacp.dvo.ru; www.iacp.dvo.ru



«ЗАВЕРЯЮ»
СЕКРЕТАРЬ ИАПУ ДВО РАН
И.О.

Д.А. ЦУКАНОВ

27.03.2026 г.