

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА ФТИ 34.01.02
ПРИ ФЕДЕРАЛЬНОМ ГОСУДАРСТВЕННОМ БЮДЖЕТНОМ УЧРЕЖДЕНИИ
НАУКИ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКОМ ИНСТИТУТЕ ИМ. А.Ф. ИОФФЕ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА НАУК

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 18.06.2020 г. № 6

О присуждении Семиной Марине Александровне, гражданину РФ, ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация **«Теория кулоновских комплексов в полупроводниках и наносистемах»** по специальности 01.04.02 – теоретическая физика принята к защите 23 января 2020 г., протокол №4 диссертационным советом 34.01.02 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки (ФГБУН) Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, расположенном по адресу 194021, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 26, утвержденным 12 июля 2019 г. приказом ФТИ им. А.Ф. Иоффе №. 75.

Соискатель Семина Марина Александровна, 1982 года рождения, защитила диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук «Электрон-дырочные комплексы в квантовых ямах и в квантовых проволоках» в 2009 году в специализированном совете Д 002.205.01 при Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированных сред. Соискатель работает старшим научным сотрудником в секторе теоретических основ микроэлектроники отделения твердотельной электроники федерального государственного бюджетного учреждения науки Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук.

Диссертация выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, расположенном по адресу 194021, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 26.

Официальные оппоненты:

1. **Аверкиев Никита Сергеевич**, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, заведующий сектором теории оптических и электрических явлений в полупроводниках

2. **Арсеев Петр Иварович**, доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук, главный научный сотрудник лаборатории теории твердого тела

3. **Гиппиус Николай Алексеевич**, доктор физико-математических наук, Автономная некоммерческая образовательная организация высшего профессионального образования «Сколковский институт науки и технологий», профессор центра фотоники и квантовых материалов

дали **положительные** отзывы на диссертацию.

Ведущая организация - Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» - в своем **положительном** заключении, подписанном заведующим кафедрой квантовой механики, д.ф.-м.н., профессором В.М. Шабаетовым и утвержденным проректором по научной работе С.В. Микушевым, отметило, что диссертационная работа выполнена на высоком научном уровне и вносит существенный вклад в развитие теории кулоновских комплексов в полупроводниках и наноструктурах. В отзыве содержится 6 замечаний, которые носят методический или дискуссионный характер:

1). На стр. 24 - «Кулоновское отталкивание между носителями заряда одного знака (двумя электронами или двумя дырками) описывается эффективным

потенциалом, подобным (1.7)». Потенциал (1.7) является чисто кулоновским. Что можно сказать об обменном взаимодействии, им пренебрегается?

2) На протяжении всего текста диссертации автор противопоставляет вариационный метод решения задачи более трудоемкому методу, основанному на прямой диагонализации матрицы Гамильтона. Хотелось бы обратить внимание, что метод, который основан на разложении волновой функции по базису, что приводит к задаче на собственные значения матрицы гамильтониана, также является вариационным. Это, так называемый, линейный вариационный принцип Ритца.

3) На стр. 56 в формуле (1.71) волновая функция основного состояния электронной подсистемы представлена в виде произведения N одночастичных функций, зависящих только от пространственных координат. Эта функция удовлетворяет принципу Паули? Почему не учтена антисимметризация с учетом спиновых переменных?

4) На стр. 59 отмечено, что вариационные параметры в формуле (1.79) имеют ясный физический смысл. Однако объяснение этому факту является слишком кратким и непонятным. Имело бы смысл дать более подробную физическую интерпретацию формул (1.78) и (1.79), если таковая существует.

5) На стр. 230 в формуле (5.8) для величины квантового дефекта в знаменателе находится величина спин-орбитального расщепления. Есть ли какое-то физическое объяснение этому факту? Если формула (5.8) работает в широком диапазоне, было бы странно обнаружить бесконечный рост квантового дефекта при стремлении спин-орбитального расщепления к нулю. Иными словами, формула (5.8) не имеет нерелятивистского предела.

6) Непонятным выглядит утверждение о том, что «основной вклад в квантовые дефекты в кристаллах вносит сложная структура валентной зоны закиси меди, спин-орбитальная связь ...». Обращает на себя внимание, что величина квантового дефекта согласно формуле (7) автореферата и (5.8) диссертации содержит только индекс 1 (орбитальное квантовое число) и поэтому квантовый дефект получается одинаковым для разных компонент спин-орбитального расщепления. Как этот факт коррелирует с важной ролью спин-орбиты?

В отзыве указано, что эти замечания не снижают высокой научной значимости проведенных исследований и общей высокой оценки диссертационной работы, а существенных замечаний, которые бы поставили под сомнение основные выводы диссертационной работы, нет. Научные положения и результаты диссертации хорошо аргументированы и обоснованы. Основные результаты работы полностью отражены в публикациях в авторитетных российских и международных журналах, докладывались на российских и международных конференциях. По актуальности темы, новизне и достоверности результатов, научной и практической значимости работа полностью отвечает требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям действующим «Положением о присуждении ученых степеней» ФТИ им. А.Ф. Иоффе, а автор диссертационной работы – Семина Марина Александровна, безусловно, заслуживает присуждения ей степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обусловливался сходством тематик работ, проводимых ведущей организацией и оппонентами, с тематикой диссертационной работы.

На автореферат поступило 7 отзывов, все отзывы **положительные**:

- 1) Отзыв доктора физико-математических наук, доцента лаборатории оптоэлектроники кафедры физики полупроводников и криоэлектроники ФГБОУ ВО МГУ им. М.В. Ломоносова (119991 г. Москва, Ленинские горы, д. 1, корп. 2) **Манцевича Владимира Николаевича**, отзыв положительный, содержит два замечания:
 - а) На рисунке 5 автореферата приведены зависимости энергии связи биэкситона от радиуса квантовой точки для случае прямоугольного потенциала и потенциала гармонического осциллятора. Для случая потенциала гармонического осциллятора вклад, вычисленный отдельно для дырок, значительно превосходят вклады, полученные от электронов и без учета поляризационных членов. В случае прямоугольного потенциала

такой сильной разницы не наблюдается. Чем обусловлено данное различие в поведении вкладов от дырок для разных типов потенциала?

б) В диссертации исследованы трионы в гетероструктурах, содержащих один и два слоя дихалькогенидов переходных металлов. Представляется интересным обсудить вопросы о применении разработанной теории для большего числа монослоев и о числе монослоев, для которого исследуемая структура перестает быть двумерной и становится объемной. Позволяет ли разработанный в диссертации теоретический подход проследить такой переход?

- 2) Отзыв доктора физико-математических наук, заведующего лабораторией теоретической физики ФГБУН Института физики полупроводников А.В. Ржанова СО РАН (Новосибирск, 630090, пр. Ак. Лаврентьева, 13) **Ковалева Вадима Михайловича**, отзыв положительный, содержит замечание:

При обсуждении энергии связи трионов (в частности, в монослоях дихалькогенидов переходных металлов) наличием свободных носителей заряда пренебрегается. С другой стороны, как видно из рис. 7 автореферата, в экспериментальных спектрах присутствуют изменения как энергии связи, так и сил осциллятора трионных состояний с изменением легирования структуры. Этот эффект следовало бы пояснить.

- 3) Отзыв доктора физико-математических наук, главного научного сотрудника лаборатории спектроскопии твердого тела ФГБУН Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН (С.Петербург, 194021, ул. Политехническая, 26) **Кочерешко Владимира Петровича**, отзыв положительный без замечаний.
- 4) Отзыв доктора физико-математических наук, главного научного сотрудника, заведующего лабораторией №1.4 – лазерного охлаждения и ультрахолодной плазмы ФГБУН Объединенного института высоких температур РАН (125412, Москва, улица Ижорская, дом 13, строение 2) **Зеленера Бориса Борисовича**, отзыв положительный, без замечаний.
- 5) Отзыв доктора физико-математических наук, профессора Технического

университета Дортмунда **Яковлева Дмитрия Робертовича** и профессора, назначенного ректора Технического университета Дортмунда **Байера Манфреда** (Otto-Hahn-Straße 4a, D-44227 Дортмунд, Германия), отзыв положительный, без замечаний.

- 6) Отзыв доктор физико-математических наук, профессора, главного научного сотрудника физико-технического факультета, руководителя международной научной лаборатории фотопроцессов в мезоскопических системах Университета ИТМО (Санкт-Петербург, Кадетская линия, д. 3, к. 2, лит. А, 204) **Иорша Ивана Владимировича**, отзыв положительный, содержит три замечания:

а) В последнем параграфе на странице 8 представлено выражение для однопараметрической волновой функции. По всей видимости, в аргументе экспоненты стоит модуль относительной координаты.

б) В пояснении к формуле 2 на странице 15 объясняется значение функции G , а в самой формуле эта функция, по всей видимости, обозначена как H .

в) В обсуждении рисунка 8 на странице 25, обсуждается радиационное время жизни экситонов. Однако, кажется, что измерения сигнала ФЛ с временным разрешением дают представление о полном времени жизни, учитывающем как радиационное, так и нерадиационное уширение. Полный фактор Парселла, рассчитанный на основе матриц переноса, позволяет рассчитать как полное, так и радиационное уширение.

- 7) Отзыв доктора физико-математических наук, члена-корреспондента РАН, главного научного сотрудника отделения физики твердого тела ФГБУН Физического института им. П.Н. Лебедева РАН (119991 ГСП-1 Москва, Ленинский проспект, д. 53) **Сибельдина Николая Николаевича**, отзыв положительный содержит вопрос:

По-видимому, результаты, полученные при вычислении энергии связи экситонов в квантовых проволоках, могут быть использованы для расчетов энергии связи экситонов в объемных кристаллах в сильных магнитных полях, таких, что магнитная длина меньше (и даже много меньше) боровского радиуса экситона. Можно ли результаты, полученные для

трионов в квантовых проволоках, обобщить на случай сильного магнитного поля в объемных материалах; можно ли в этом случае получить магнитостабилизированный трион?

Диссертационный совет отмечает, что на **основании выполненных соискателем исследований** решен большой комплекс теоретических задач, являющихся актуальными для современной физики полупроводников.

- 1) Предложен и апробирован универсальный метод построения пробных функций, позволяющий вычислить энергию связи основного состояния электрон-дырочных комплексов, локализованных на неоднородностях интерфейсов квантовых ям и квантовых проволок, в том числе с учетом сложной структуры зон.
- 2) Продемонстрировано, что величина и знак энергии связи биэкситона, локализованного в квантовой точке, определяются как корреляциями между носителями заряда одного знака, так и соотношением размеров областей локализации электронов и дырок. При достаточно большом различии последних энергия связи биэкситона отрицательна.
- 3) Построена теория экситонов и трионов в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах с одним и двумя монослоями дихалькогенидов переходных металлов. Показано, что различие энергий связи X^+ и X^- трионов, а также тонкая структура X^- триона в материалах на основе W обусловлены короткодействующей частью обменного взаимодействия между носителями.
- 4) Разработана теория тонкой структуры ридберговских экситонных состояний в объемных кубических кристаллах. Исследован скейлинг экситонных состояний с главным квантовым числом, развита модель квантовых дефектов для описания экситонной серии, выявлены причины отклонения экситонной серии от водородоподобной.

Практическая значимость результатов состоит в следующем:

- 1) Разработан вариационный метод для расчета параметров состояний электрон-дырочных комплексов в полупроводниковых системах различной размерности, включая нульмерные, одномерные и двумерные системы, позволяющий с умеренными вычислительными затратами определять строение и энергии связи кулоновских комплексов;
- 2) Построена теория локализации носителей заряда и эффекта Зеемана в “сложной” зоне;
- 3) Развита теория эффекта Парселла на экситонах в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах, продемонстрирована возможность модуляции радиационного времени жизни экситона на порядок величины;
- 4) Построена теория ридберговских состояний экситонов в объемных полупроводниковых кристаллах, продемонстрированы скейлинговые закономерности основных параметров экситонных состояний.

Диссертация является законченным, последовательным и внутренне согласованным научным трудом, имеющим фундаментальное значение.

Достоверность и надёжность результатов. Основные положения и выводы диссертации надежно обоснованы теоретически и экспериментально. Все рассмотренные эффекты имеют убедительные физические объяснения. Достоверность и надёжность полученных теоретических результатов подтверждаются их внутренней согласованностью и согласием с экспериментальными данными. Результаты всех численных расчетов проверены с точки зрения симметричного и аналитического описания изучаемых эффектов.

Личный вклад автора состоит в выборе направления исследований, постановке задач, построении аналитических теорий и проведении расчётов, анализе и интерпретации экспериментальных данных, подготовке основных публикаций и представлении результатов на научных мероприятиях.

Результаты исследований, вошедшие в диссертацию, докладывались на VII – XIII Российских конференциях по физике полупроводников (Звенигород, 2005,

2015; Екатеринбург, 2007, 2017; Новосибирск – Томск, 2009; Нижний Новгород, 2011; Санкт-Петербург, 2013), международных симпозиумах “Наноструктуры: физика и технология” (Санкт-Петербург, 2005, 2013, 2016, 2017; Новосибирск, 2007; Минск, 2009; Нижний Новгород, 2012), 14ой “Международной конференции по сверхрешеткам, наноструктурам и наноприборам” (Стамбул, Турция, 2006), Российско-швейцарском семинаре “Экситоны и экситонные конденсаты в локализованных полупроводниковых системах” (Москва, 2006), 2ой международной школе по нанофотонике (Марatea, Италия, 2007), 17ой “Международной конференции по электронным свойствам двумерных систем” (Генуя, Италия, 2007), 22ой “Общей конференции отделения физики конденсированного состояния Европейского физического общества” (Рим, Италия, 2008), XII школе молодых ученых “Актуальные проблемы физики”(Звенигород, 2008), 25ой “Международной конференции по дефектам в полупроводниках” (Санкт-Петербург, 2009), Международных конференциях по физике полупроводников (Цюрих, Швейцария, 2012; Монпелье, Франция, 2018), XX международном симпозиуме “Нанофизика и нанoeлектроника” (Нижний Новгород, 2016), а также были представлены в приглашенных докладах на Международной зимней школе по физике полупроводников (Зеленогорск, 2012 и 2019), Международной конференции “Метаматериалы и нанофизика” (Варадеро, Куба 2015), XIV Российской конференции по физике полупроводников (Новосибирск, 2019), Международном семинаре “Спинтроника и долиотроника в двумерных материалах” (Тэджон, Республика Корея, 2019), Международной конференции “Новые направления в квантовом свете и нанофизике” (Марatea, Италия 2019), 1-3 Международных семинарах “Ридберговские экситоны в полупроводниках” (Санкт-Петербург 2017; Орхус, Дания, 2018; Дарем, Великобритания, 2019), XXI Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и нано- электронике. Результаты исследований представлялись и обсуждались также на семинарах ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербургского государственного университета, Национального исследовательского центра “Курчатовский институт”, Физического института им. Лебедева, Объединённого института высоких температур, Университета ИТМО,

университетов Бильбао (Испания), Дортмунда (Германия), Клермон-Феррана (Франция).

Основное содержание диссертации представлено в 27 научных статьях, из них наиболее важными являются следующие (в скобках указан личный вклад автора):

- 1) М.А. Семина, Р. А. Сергеев, Р.А. Сурис, Энергия связи экситона и X^+ , X^- -трионов в одномерных системах // ФТП 42, 1459 (2008). (Предложены оригинальные пробные функции для расчета энергии связи экситонов и трионов в квазиодномерных квантовых проволоках. Рассчитана зависимость энергии связи экситона и трионов от радиуса проволоки и от отношения масс электрона и дырки. Проанализирована стабильность возбужденных состояний трионов, в том числе в рамках адиабатического приближения.)
- 2) М.А. Семина, Р.А. Сурис, Кулоновские состояния в наноструктурах, случайное вырождение и оператор Лапласа-Рунге-Ленца // Письма в ЖЭТФ 94, 614 (2011). (Исследована структура энергетического спектра двумерного кулоновского комплекса с пространственным разделением заряда (пространственно-непрямого экситона и электрона на донорной примеси в барьере квантовой ямы). Численно прослежен переход между предельными случаями, где реализуется «случайное» вырождение спектра, связанное с наличием скрытых симметрий гамильтониана.)
- 3) М. А. Семина, Р.А. Сурис, Локализованные в наноструктурах дырки во внешнем магнитом поле: g-фактор и смешивание состояний // ФТП 49, 817 (2015). (Построен численный метод для нахождения состояний дырки в валентной зоне Γ_8 , локализованной в эллипсоидальной квантовой точке с параболическим потенциальным профилем с произвольным соотношением осей, во внешнем магнитном поле. Получена зависимость продольного g-фактора дырки от геометрических параметров квантовой точки. Исследован переход от предельного случая квантового диска к предельному случаю квантовой проволоки (через случай сферически-симметричной точки). Исследовано влияние гофрировки валентной зоны.)
- 4) А.А. Головатенко, М.А. Семина, А.В. Родина, Т.В. Шубина, Биэкситон в

- квантовых точках A^2B^6 с различными локализуемыми потенциалами // ФТТ 59, 1192 (2017). (Исследована роль корреляций между носителями заряда одного типа. Вычислена зависимость энергии связи биэкситона от радиуса квантовой точки в предельных случаях простой валентной зоны и в пределе малых отношений масс легкой и тяжелой дырок с различным числом поляризационных членов.)
- 5) E. V. Shornikova, L. Biadala, D. R. Yakovlev, D. Feng, V. F. Sapega, N. Flipo, A. A. Golovatenko, M. A. Semina, A. V. Rodina, A. A. Mitioglu, M. V. Ballottin, P. C. M. Christianen, Y. G. Kusrayev, M. Nasilowski, B. Dubertret, and M. Bayer, Electron and Hole g-Factors and Spin Dynamics of Negatively Charged Excitons in CdSe/CdS Colloidal Nanoplatelets with Thick Shells // Nano Lett. 18, 373 (2018). (Сделаны оценки g-факторов дырки в коллоидных планарных квантовых точках CdSe/CdS, проанализировано влияние формы потенциала конфинмента (параболический, гауссов, прямоугольный) и симметрии точки (сферическая или планарная квантовая точка).)
- 6) М. А. Семина, Экситоны и трионы в двухслойных ван-дер-ваальсовых гетероструктурах // ФТТ 61, 2234 (2019).
- 7) E. Courtade, M. Semina, M. Manca, M. M. Glazov, C. Robert, F. Cadiz, G. Wang, T. Taniguchi, K. Watanabe, M. Pierre, W. Escoffier, E. L. Ivchenko, P. Renucci, X. Marie, T. Amand, and B. Urbaszek, Charged excitons in monolayer WSe₂: Experiment and theory // Phys. Rev. B 96, 085302 (2017). (Расчет вариационным методом энергии связи трионов в монослоях дихалькогенидов переходных металлов в зависимости от параметров экранировки и от отношения эффективных масс электрона и дырки. Описание тонкой структуры энергетического спектра трионов. Оценка расщепления трионных состояний, обусловленная короткодействующей частью обменного взаимодействия между электронами.)
- 8) H. H. Fang, B. Han, C. Robert, M. A. Semina, D. Lagarde, E. Courtade, T. Taniguchi, K. Watanabe, T. Amand, B. Urbaszek, M. M. Glazov, X. Marie, Control of the Exciton Radiative Lifetime in van der Waals Heterostructures // Phys. Rev. Lett. 123, 067401 (2019). (Выдвинута идея о возможности

управления радиационным временем жизни экситона в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах за счет вариации толщины окружающих слоев нитрида бора. Расчет радиационного времени жизни экситона в ван-дар-ваальсовой гетероструктуре с одним монослоем дихалькогенида переходных металлов и описание экспериментальных данных.)

- 9) J. Thewes, J. Heckotter, T. Kazimierczuk, M. Assmann, D. Frohlich, M. Bayer, M. A. Semina, and M. M. Glazov, Observation of High Angular Momentum Excitons in Cuprous Oxide // Phys. Rev. Lett. 115, 027402 (2015). (Разработка модели тонкой структуры экситонных состояний в кристаллах закиси меди. Расчет энергий P- и F- состояний экситона в зависимости от главного квантового числа, а также расщеплений F-состояний, в рамках многозонной модели.)

На заседании 18 июня 2020 г. диссертационный совет принял решение присудить Семиной М.А. ученую степень доктора физико-математических наук.

При проведении открытого голосования диссертационного совета в количестве 20 человек, из них 7 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, проголосовали:

За присуждение Семиной Марине Александровне ученой степени доктора физико-математических наук

подано голосов – 20.

Против – 0.

Недействительных бюллетеней – 0.

Председатель диссертационного совета,

акад. РАН,

д. ф.-м. н., профессор

Ученый секретарь диссертационного совета,

д. ф.-м. н.

Сурис Роберт Арнольдович

Сорокин Лев Михайлович

18 июня 2020 г.