

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 КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 22.10.2020 г. № 12

О присуждении Белолипецкому Алексею Владимировичу, гражданину РФ, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация **«Моделирование электронных состояний в кремниевых, германиевых и германий-кремниевых нанокристаллах»** по специальности 01.04.10 – физика полупроводников принята к защите 25 июня 2020 г., протокол №8 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 директора ФТИ им. А.Ф. Иоффе No. 75.

Соискатель Белолипецкий Алексей Владимирович, 1991 года рождения, в 2015 году завершил обучение в Санкт-Петербургском государственном электротехническом университете «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина) по специальности «электроника и наноэлектроника» и поступил в аспирантуру ФТИ им. А.Ф. Иоффе, год окончания – 2019, в настоящее время работает в должности младшего научного сотрудника в секторе теории оптических и электрических явлений в полупроводниках Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Физико-технический институт 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.

Научный руководитель — Яссиевич Ирина Николаевна, профессор, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник сектора теории оптических и электрических явлений в полупроводниках в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки «Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук».

Официальные оппоненты:

1. **Бурдов Владимир Анатольевич**, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой теоретической физики Физического факультета Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского», ведущий научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории кафедры теоретической физики физического факультета ННГУ им. Н.И. Лобачевского;

2. **Каган Мирон Соломонович**, доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт радиотехники и электроники имени В.А. Котельникова Российской академии наук, главный научный сотрудник, зав. лабораторией электронных процессов в полупроводниковых материалах Отдела полупроводниковой электроники – дали **положительные** отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» (ФГАОУ ВО СПбПУ) – в своем положительном заключении, подписанном доктором физико-математических наук, профессором Высшей инженерно-физической школы Гасумянцем Виталием Эдуардовичем и утвержденным проректором по научной работе ФГАОУ ВО СПбПУ, доктором физико-математических наук, член-корреспондентом Российской академии наук, профессором Сергеевым Виталием Владимировичем,

отметила, что диссертационная работа выполнена на высоком научном уровне на актуальную тему и результаты и развитые подходы могут быть использованы при теоретическом исследовании наноструктур и наноматериалов различного типа, а также при разработке в дальнейшем приборов опто- и наноэлектроники нового поколения.

В отзыве содержится 5 замечаний:

1) При моделировании автором осуществлен подбор параметров модели сильной связи для виртуального кристалла оксида кремния. В диссертации указано, что эти параметры подбирались таким образом, чтобы воспроизвести зонную структуру β -кристобалита. Однако количество этих параметров очень велико (см. табл. 1.1, табл. 2.1), а зонный спектр при их использовании воспроизводится далеко не полностью (см. рис. 1.2). Не ясно, какие количественные критерии использовались автором при выборе указанных параметров и насколько однозначен этот выбор.

2) В работе задается шарообразная форма нанокристаллов. Возникает вопрос, влияет ли возможное изменение этой правильной геометрической формы, а также дисперсия в размере различных внедренных нанокристаллов, что очевидно должно реализовываться в реальных структурах, на результаты проведенных расчетов.

3) В главе 1 проведен расчет сечения поглощения для нанокристаллов кремния в матрице аморфного оксида кремния, сравнение результатов которого с экспериментальными данными (см. рис. 1.11) используется автором в качестве доказательства правомерности полученных им результатов. Автору следовало бы более подробно описать представленные на рис. 1.11 результаты. Спектр поглощения выглядит достаточно нестандартно, в нем хорошо видно наличие нескольких особенностей, наблюдаемых при различных значениях энергии фотона. Хотелось бы понять, с какими конкретно электронными переходами в использованной автором зонной структуре исследуемого материала связаны эти особенности.

4) На рис. 1.10 и рис. 2.6 автором приведены рассчитанные распределения локальной плотности электронных состояний в Si и Si/Ge нанокристаллах в матрице SiO₂. Хорошо видно, что заметное значение плотности состояний наблюдается на расстояниях, заметно превышающих размеры соответствующих

нанокристаллов, при этом падения этого значения до нуля в ряде случаев не происходит. В чем причина подобного распределения?

5) При расчете резонансного туннелирования электронов в структурах с нанокристаллами кремния в матрице аморфного кремния (раздел 3.2.3 диссертационной работы) автором вместо δ -функции использовался лоренциан с полушириной, равной 5 мэВ. В работе не указано, чем определялось именно такое значение разброса энергии.

Указанные недостатки не являются принципиальными, не противоречат всем основным результатам и выводам, сформулированным в работе, и не уменьшают, тем самым, научную значимость проведенного А.В. Белолипецким исследования.

В отзыве указано, что диссертационная работа Белолипецкого Алексея Владимировича на тему: «Моделирование электронных состояний в кремниевых, германиевых и германий-кремниевых нанокристаллах», представленная на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников, является законченной научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований решена научная проблема, имеющая существенное значение для современной физики полупроводников – предложен, обоснован и апробирован метод теоретического моделирования свойств носителей заряда в наноструктурах, содержащих нанокристаллы различного типа, внедренные в аморфную матрицу.

Уровень диссертации соответствует всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а соискатель, Белолипецкий Алексей Владимирович, заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обуславливался близостью тематик работ, проводимых ведущей организацией и оппонентами, и тематики диссертационной работы. На все замечания были даны исчерпывающие квалифицированные ответы.

На автореферат поступило 3 отзыва, все отзывы **положительные**:

1) Отзыв доктора физико-математических наук, заведующего научно-

исследовательской лабораторией функциональных наноматериалов ННГУ им. Н.И. Лобачевского **Машина Александра Ивановича** и кандидата физико-математических наук, доцента кафедры физики полупроводников, электроники и наноэлектроники физического факультета ННГУ им. Н.И. Лобачевского **Ершова Алексея Валентиновича**, отзыв положительный, без замечаний.

- 2) Отзыв доктора физико-математических наук, доцента, ведущего научного сотрудника лаборатории спиновые и оптические явления в полупроводниках Физико-технического института им. А. Ф. Иоффе РАН **Коренева Владимира Львовича**, отзыв положительный содержит 2 замечания:

а) Из текста автореферата (Глава 3) не совсем ясно, учитывалось ли кулоновское взаимодействие электрона и дырки в нанокристалле (или кулоновские корреляции с окружающими нанокристалл зарядами) при расчете вероятности туннелирования одного из носителей в a-Si:H матрицу.

б) В тексте автореферата (за исключением результатов Главы 1) я не увидел сравнения результатов расчетов с экспериментальными данными, имеющимися в литературе. Это украсило бы текст автореферата.

- 3) Отзыв доктора физико-математических наук, члена-корреспондента РАН гнс Отделения теоретической физики им. И.Е. Тамма Физического института им. П.Н. Лебедева РАН **Арсеева Петра Иваровича**, отзыв положительный содержит 2 замечания:

а) Единственное, чего иногда не хватает — это немного более полного пояснения некоторых понятий или предположений.

Например, термин «режим долинного фильтра» (раздел о цепочках нанокристаллов): в автореферате не даётся никаких объяснений — в чём, собственно, заключается этот эффект.

б) Или в автореферате упоминается о предположении, что нанокристаллы в матрице не деформированы, но почти ничего не сказано о том, что

предполагается об эффектах деформации вокруг нанокристалла и надо ли их учитывать.

Диссертационный совет отмечает, что на **основании выполненных соискателем исследований** решен большой комплекс теоретических и вычислительных задач, являющихся актуальными для современной физики полупроводников в целом и кремниевых и германий-кремниевых наноструктур в частности.

- 1) Высказана идея, что вблизи нанокристаллов кремния аморфная матрица SiO_2 будет стремиться воспроизвести кубическую полиморфную модификацию кремнезёма, а именно β -кристобалит. Показано, что в этом случае для горячих электронов появляется возможность перехода на состояния вблизи Γ -точки зоны Бриллюэна матрицы. Эта идея подтверждена хорошим согласием теоретических расчётов бесфононного сечения поглощения электромагнитного излучения с экспериментально полученными спектрами поглощения одиночных кремниевых нанокристаллов в матрице SiO_2 .
- 2) Проведено моделирование состояний электронов и дырок в кремниевых, германиевых и германий-кремниевых нанокристаллах в матрице SiO_2 методом сильной связи в варианте $sp^3d^5s^*$ с использованием для матрицы приближения виртуального кристалла на основе β -кристобалита SiO_2 .
- 3) Найдена зависимость сечения бесфононного поглощения электромагнитного излучения от энергии фотона в широком энергетическом диапазоне для германий-кремниевых нанокристаллов с различной долей германия.
- 4) Предложен механизм безызлучательного ухода электронов из экситонного состояния в нанокристалле на ближайшее локализованное хвостовое состояние матрицы аморфного кремния, который определяет короткое время жизни экситонов в нанокристаллах кремния размером 3 нм и менее, внедрённых в матрицу аморфного гидрогенизированного кремния.

Практическая значимость результатов состоит в построении модели электронных и дырочных состояний в кремниевых, германиевых и германий-кремниевых нанокристаллах, внедрённых в аморфную матрицу, что позволит проводить теоретический анализ оптических и электронных свойств таких наноструктур и откроет возможность теоретического моделирования различных устройств с такими нанокристаллами.

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

Достоверность и надёжность результатов. Основные положения и выводы диссертации теоретически обоснованы и согласуются с экспериментом. Все полученные результаты прошли апробацию различными независимыми современными диагностическими средствами. Они многократно обсуждались на различных российских и международных конференциях.

Апробация работы. Результаты исследований, вошедшие в диссертацию, докладывались на XI и XIII Российских конференциях по физике полупроводников (С.-Петербург, 2013; Екатеринбург, 2017); 9 и 11 Российских конференциях «Физико-химические проблемы возобновляемой энергетики» (С.-Петербург, 2013, 2015); IX международной конференции «Аморфные и микрокристаллические полупроводники» (С.-Петербург, 2014); Международном симпозиуме «Кремниевые наночастицы» (Бертиноро, Италия, 2018); XXIII Международном симпозиуме «Нанофизика и наноэлектроника» (Н. Новгород, 2019); XXI Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике (С.-Петербург, 2019).

Основное содержание диссертации опубликовано в 7 научных статьях. Наиболее важными являются следующие (в скобках указан личный вклад автора):

- 1) M.O. Nestoklon, I.D. Avdeev, A.V. Belolipetskiy, et al. «Tight-binding calculations of the optical properties of Si nanocrystals in a SiO₂ matrix», *Faraday Discussions* **222**, 258 (2020).

(Проведено моделирование электронных состояний в сферических Si нанокристаллах в матрице SiO₂ в широком энергетическом диапазоне. Путём сравнения с экспериментальными данными по сечению поглощения для одиночного нанокристалла уточнено взаимное энергетическое положение нанокристалла и матрицы. Для нанокристалла с размером 3 нм рассчитаны матричные элементы оптических переходов.)

- 2) I.D. Avdeev, A.V. Belolipetsky, N. Na, et al. «Absorption of Si, Ge and SiGe alloy nanocrystals embedded in SiO₂ matrix», *Journal of Applied Physics* **127** (11), 114301 (2020).

(Проведено моделирование электронных состояний в сферических SiGe нанокристаллах в матрице SiO₂ в широком энергетическом диапазоне. Для нанокристаллов с размерами 2.5, 3 и 3.5 нм и разной долей германия рассчитаны матричные элементы оптических переходов.)

- 3) Belolipetsky A.V., Nestoklon M.O., Yassievich I.N. «Tight-binding calculations of SiGe alloy nanocrystals in SiO₂ matrix», *Journal of Physics: Condensed Matter.*, **31** (38), 385301 (2019).

(Проведено моделирование электронных состояний в сферических SiGe нанокристаллах в матрице SiO₂ в широком энергетическом диапазоне. Для виртуального кристалла произведён подбор параметров к структуре реального β-кристаллита.)

- 4) O.B. Gusev, A.V. Belolipetskiy, I.N. Yassievich, et al. «Lifetime of excitons localized in Si nanocrystals in amorphous silicon», *ФТП*, **50** (5), 639 (2016).

(Вычислены скорости резонансных туннельных переходов электронов и дырок из экситонного состояния в нанокристалле на ближайшее хвостовое состояние в аморфной матрице и скорости ухода их вглубь матрицы за счёт резонансного туннелирования.)

- 5) Belolipetskiy A., Gusev O., Yassievich I. «Carriers Transport in Amorphous Hydrogenated Silicon with Silicon Nanocrystals», *J. Nanoelectron. Optoelectron.*, **9** (6), 750 (2014).

(Вычислены скорости резонансных туннельных переходов электронов и дырок из экситонного состояния в нанокристалле на ближайшее хвостовое состояние в аморфной матрице.)

На заседании 22 октября 2020 г. диссертационный совет принял решение присудить Белолипецкому А.В. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении открытого голосования диссертационного совета в количестве 20 человек, из них 13 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, проголосовали:

За присуждение Белолипецкому Алексею Владимировичу ученой степени кандидата физико-математических наук

подано голосов – 20.

Против – 0.

Недействительных бюллетеней – 0.

Председатель диссертационного совета,
акад. РАН,
д. ф.-м. н., профессор

Сурис Роберт Арнольдович

Ученый секретарь диссертационного совета,
д. ф.-м. н.

Сорокин Лев Михайлович

22 октября 2020 г.