

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА ФТИ 34.01.02
НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО
УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКОГО ИНСТИТУТА
ИМ. А.Ф. ИОФФЕ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК
по специальности 01.04.02 – теоретическая физика

Аттестационное дело № _____

Решение диссертационного совета от 23 декабря 2021 года № _8__

О присуждении Авдееву Ивану Дмитриевичу, гражданину РФ, ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика.

Диссертация «Эффекты междолинного смешивания в наноструктурах из халькогенидов свинца» по специальности 01.04.02 - «Теоретическая физика» принята к защите 21 октября 2021 года, протокол № 21/21 от 17.06.2021, диссертационным советом 34.01.02 при 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, утвержденным приказом ФТИ им. А.Ф. Иоффе № 75 от 12 июля 2019 г.

Соискатель Авдеев Иван Дмитриевич, 1993 года рождения, окончил магистратуру Федерального государственного бюджетного учреждения высшего образования и науки «Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет Российской академии наук», расположенный по адресу 194021, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, д. 8, к. 3, лит. А, по специальности 03.04.02 — «Физика», диплом № 107824 2308224, дата выдачи 22 июня 2017 года. В 2017 году соискатель поступил в

аспирантуру ФТИ им. А.Ф. Иоффе, год окончания — 2021, в настоящее время работает в должности младшего научного сотрудника в секторе теории квантовых когерентных явлений в твердом теле Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук.

Диссертационная работа 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 — доктор физико-математических наук Нестоклон Михаил Олегович, старший научный сотрудник сектора теории квантовых когерентных явлений в твердом теле Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук.

Официальные оппоненты:

1. доктор физико-математических наук Манцевич Владимир Николаевич, доцент кафедры физики полупроводников и криоэлектроники, ведущий научный сотрудник центра квантовых технологий Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», 119991, г. Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.
2. доктор физико-математических наук Иорш Иван Владимирович, профессор, руководитель международной научной лаборатории фотопроцессов в мезоскопических системах, главный научный сотрудник физического факультета Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО», дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация — федеральное государственное бюджетное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» (СПбГУ), Санкт-Петербург — в своем положительном отзыве, подписанном Владимиром Германовичем Дубровским, доктором физико-математических наук, профессором кафедры физики твердого тела СПбГУ, Сергеем Юрьевичем Вербиным, доктором физико-математических наук, профессором кафедры физики твердого тела СПбГУ с возложением обязанностей заведующего кафедрой и Иваном Владимировичем Игнатьевым, доктором физико-математических наук, профессором, секретарем семинара лаборатории Оптики спина СПбГУ указала, что диссертационная работа И.Д. Авдеева выполнена на высоком научном уровне и вносит значительный вклад в развитие теоретических методов исследования многодолинных полупроводниковых наносистем. Автореферат адекватно отражает содержание диссертации. Представленная диссертация соответствует всем требованиям, предъявляемых к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Ее автор — Иван Дмитриевич Авдеев несомненно заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 - «Теоретическая физика». В отзыве имеется пять замечаний:

1. В диссертации недостаточно внимания уделено составу и перекрытию орбиталей электронных и дырочных состояний вблизи экстремума зон в L долинах. Явное указание распределения орбиталей по разным атомам позволило бы лучше обосновать пренебрежение внутриатомными кулоновскими интегралами.
2. Результаты расчета состояний в нанопроволоках из PbSe не были сопоставлены с экспериментом. Это не является серьезным недостатком теоретической работы, однако позволило бы лучше обосновать полученные результаты.
3. Анализ симметрии электронных, дырочных и экситонных состояний в квантовых точках из PbS приведен в 4 главе, в то время как его результаты

используются в третьей главе для описания расчета методом сильной связи. Это затрудняет чтение текста диссертации.

4. Для лучшего объяснения Рис. 3.2, на котором изображена зависимость энергии уровней размерного квантования от формы и размера квантовых точек, желательно было бы привести графики локальной плотности электронных и дырочных состояний в квантовых точках.
5. Модель квантовых точек с дефектами вызывает вопросы. При расчете крайне тонких расщеплений (доли мэВ) в нулевом магнитном поле в диссертации пренебрегается анизотропией окружения квантовых точек, обусловленной зарядами-изображениями в диэлектрической матрице CdS, из которой сформирована их оболочка, и наличием подложки. То есть рассмотрен только один из возможных механизмов, приводящим к расщеплениям.

Указано, что вышеизложенные замечания не снижают общей исключительно высокой оценки диссертационной работы.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации связан с их высокой квалификацией, а также сходством тематик работ, проводимых ведущей организацией и оппонентами, с тематикой диссертационной работы. На все замечания соискателем даны исчерпывающие квалифицированные ответы.

На автореферат поступило 5 отзывов, все они положительные.

Отзыв кандидата физико-математических наук Чербунина Романа Викторовича, доцента кафедры физики твердого тела Санкт-Петербургского государственного университета (198504, г. Санкт-Петербург, г. Петергоф, ул. Ульяновская, д. 1). Отзыв положительный, без замечаний.

Отзыв доктора физико-математических наук Родиной Анны Валерьевны, профессора РАН, старшего научного сотрудника лаборатории Спиновых и оптических явлений в полупроводниках Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе (194021, г. Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 26). Отзыв положительный, замечание:

1. Из текста автореферата остается не понятным, влияют ли поверхностные дефекты на электронный и дырочный g фактора в долинах по отдельности или только на их вклады в изучаемый в эксперименте g фактор через изменение междолинного смешивания.

Отзыв доктора физико-математических наук Ковалева Вадима Михайловича, ведущего научного сотрудника, заведующего лабораторией теоретической физики ФГБУН Института физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН (630090, Россия, Новосибирск, пр. ак. Лаврентьева, д. 13). Отзыв положительный, замечание:

1. К недостаткам работы можно отнести отсутствие похожей модели экситона в нанопроволоках, а также то, что в расчете использовалась слишком упрощенная модель поверхностных дефектов для описания экспериментов по магнитофотолуминесценции квантовых точек.

Отзыв доктора физико-математических наук Германенко Александра Викторовича, доцента, проректора по науке, заведующего кафедрой физики конденсированного состояния и наноразмерных систем института естественных наук и математики ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» (620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19). Отзыв положительный, замечание:

1. в русском языке сдвиг Стокса, но стоксов сдвиг; рекомбинация Оже, но оже рекомбинация.

Отзыв доктора физико-математических наук Глинского Геннадия Федоровича, профессора кафедры микро- и наноэлектроники СПбГЭТУ «ЛЭТИ» (197376, г. Санкт-Петербург, ул. Профессора Попова, д. 5а, к. 5). Отзыв положительный, имеется три непринципиальных замечания:

1. При анализе экситонных состояний автор как бы не учитывает короткодействующее обменное (аннигиляционное) взаимодействие электрона и дырки. Однако именно оно приводит к эффективному "спин-

спиновому" взаимодействию электрона и дырки и, в результате, к расщеплению вырожденных экситонных состояний.

При учете дальнодействующего обмена, даже, если ограничиться только его продольной (кулоновской) составляющей, говорить об экситонах не совсем корректно, так как в этом случае к электрон-дырочным состояниям подмешивается длинноволновое электромагнитное поле, а соответствующие 2х-частичные возбуждения фактически являются поляритонами. При этом необходимо учитывать, что в отличие от прямого кулоновского, обменное взаимодействие не экранируется. Этот строгий результат следует из квантовой теории поля в ее функциональной формулировке [ТМФ, 70, 3, 358 (1987), Phys. Stat. sol. (b), 155, 501 (1989); Phys. Stat. sol. (b) 155, 513 (1989)].

2. Предложенная в работе схема «приведения состояний к каноническому виду» на наш взгляд может быть просто решена посредством введения в матричный гамильтониан малого возмущения, понижающего его симметрию и снимающего вырождение.
3. Автор допускает типичную для большинства исследователей ошибку, когда в рамках модели с эффективным k -гамильтонианом огибающей волновой функции в k -представлении $\langle \mathbf{k} | F \rangle = F(\mathbf{k})$ посредством фурье-преобразования сопоставляют огибающую волновую функцию в x -представлении $F(\mathbf{x})$. Однако набор состояний $|\mathbf{k}\rangle$ в отличие от блоховских или состояний Кона-Латтинжера не удовлетворяет условию полноты, так как их число ограничено зоной Бриллюэна. Поэтому восстановить волновую функцию в координатном представлении по известной функции $F(\mathbf{k})$ можно только в узлах решетки Браве, т.е. получить $F(\mathbf{a})$. Более того, переход от функции $F(\mathbf{k})$ к функции $F(\mathbf{x})$ не является унитарным преобразованием, а сама функция $F(\mathbf{x})$, строго говоря, не является решением эффективного уравнения Шредингера (ФТП, 48, вып. 10, 1359 (2014); Письма в ЖТФ, 44, вып. 6, 17, (2018)). Это обстоятельство важно учитывать при анализе квантовых проволок и точек малых размеров.

Диссертационный совет отмечает, что **научная новизна и практическая значимость** диссертационной работы обусловлена тем, что в ней впервые систематически исследована зависимость долинных расщеплений от размера, формы поверхности и точечной симметрии в нанопроволоках и квантовых точках из халькогенидов свинца. Изучено влияние поверхностных дефектов, пассивации и релаксации поверхности на величину долинных расщеплений. Впервые на основе метода эффективной массы построена аналитическая модель тонкой структуры экситона в квантовых точках из халькогенидов свинца с кубической симметрией. Эта модель учитывает долинное расщепление уровней размерного квантования, внутри- и междолинное кулоновское взаимодействие и анизотропию оптических переходов. Она позволила установить ключевую роль междолинного обменного взаимодействия в формировании спектров экситонного поглощения, в которых доминирует один «сверх яркий», оптически активный триплет, отщепленный вверх по энергии на десятки мэВ. Наличие такого триплетного состояния приводит к асимметричному уширению пика люминесценции квантовых точек и большому стоксову сдвигу, которые наблюдаются экспериментально. Предложенная модель квантовых точек с поверхностными дефектами позволяет объяснить наблюдаемые в эксперименте g-факторы и анизотропные расщепления спектров.

Апробация работы. Результаты диссертационного исследования были представлены на XIII и XIV Российских конференциях по физике полупроводников (Екатеринбург, 2017; Новосибирск 2019), на международном симпозиуме “Nanostructures: Physics and Technology” (Санкт-Петербург, 2016), на международной зимней школе ФТИ им А.Ф. Иоффе (Зеленогорск, 2016, 2017), на международной молодежной конференции «Физика.СПб» (Санкт-Петербург, 2015), тезисы докладов были приняты на конференции PNCSPA (Санкт-Петербург, 2020) и Faraday Discussions (York, UK, 2020). Результаты работы неоднократно обсуждались на низкоразмерном и чайном семинарах ФТИ им. А.Ф. Иоффе, на рабочих семинарах в университете Дортмунда в

Германии, институте физики Ханоя во Вьетнаме и на семинаре лаборатории Оптики спина им. И. Н. Уральцева в СПбГУ.

Личный вклад автора. Основу диссертации составляют исследования, проведенные соискателем в период его обучения в аспирантуре. Автор внес значительный вклад в разработку программы для численного расчета и общее развитие метода сильной связи. Автор предложил оригинальный способ расчета оптических свойств наносистем с большим диэлектрическим контрастом. Автор провел расчеты долинного расщепления в нанопроволоках и тонкой структуры экситона в квантовых точках из халькогенидов свинца с помощью метода сильной связи. Полученные результаты были подробно проанализированы и объяснены, а также сопоставлены с экспериментом. На основе полученных результатов проводилась подготовка материалов к публикации.

По результатам исследований, составляющих содержание диссертации, опубликовано 9 научных работ в рецензируемых журналах, входящих в базы данных Web of Science и Scopus (в скобках указан личный вклад автора):

1. Avdeev I. D., Nestoklon M. O. Electronic Structure of PbSe Nanowires // J. Phys.: Conf. Ser. — 2016. — Vol. 769. — P. 012074. (Численные расчеты, написание статьи)
2. Valley and spin splittings in PbSe nanowires / I. D. Avdeev, A. N. Poddubny, S. V. Goupalov, M. O. Nestoklon // Phys. Rev. B. — 2017. — Vol. 96, no. 8. — P. 085310. (Численные расчеты, анализ результатов расчета и симметрии, написание статьи)
3. Avdeev I. D. Shape effect on the valley splitting in lead selenide nanowires // Phys. Rev. B. — 2019. — Vol. 99, no. 19. — P. 195303.
4. Intrinsic Exciton Photophysics of PbS Quantum Dots Revealed by Low-Temperature Single Nanocrystal Spectroscopy / Z. Hu, Y. Kim, S. Krishnamurthy, I. D. Avdeev, M. O. Nestoklon, A. Singh, A. V. Malko, S. V. Goupalov, et al. // Nano Lett. — 2019. — Vol. 19, no. 12. — P. 8519.

(Проведение численного моделирования, анализ экспериментальных данных, подготовка графиков)

5. Tight-binding calculations of the optical properties of Si nanocrystals in a SiO₂ matrix / M. O. Nestoklon, I. D. Avdeev, A. V. Belolipetskiy, I. Sychugov, F. Pevero, J. Linnros, I. N. Yassievich // *Faraday Discussions*. — 2020. — Vol. 222. — P. 258. (Проведение численного моделирования, анализ экспериментальных данных, подготовка графиков)
6. Absorption of Si, Ge, and SiGe alloy nanocrystals embedded in SiO₂ matrix / I. D. Avdeev, A. V. Belolipetsky, N. N. Ha, M. O. Nestoklon, I. N. Yassievich // *J. Appl. Phys.* — 2020. — Vol. 127, no. 11. — P. 114301. (Проведение численного моделирования, анализ экспериментальных данных, подготовка графиков, написание статьи)
7. Avdeev I. D., Nestoklon M. O., Goupalov S. V. Exciton Fine Structure in Lead Chalcogenide Quantum Dots: Valley Mixing and Crucial Role of Intervalley Electron–Hole Exchange // *Nano Lett.* — 2020. — Vol. 20, no. 12. — P. 8897. (Численные расчеты, построение аналитической модели, подготовка графиков, написание статьи)
8. Nestoklon M., Avdeev I. D., Goupalov S. V. Theory of excitonic states in lead salt quantum dots // *Quantum Sensing and Nano Electronics and Photonics XVII* / ed. by M. Razeghi, J. S. Lewis, G. A. Khodaparast, P. Khalili. — SPIE, 2020. — P. 112880S. (Численные расчеты, анализ результатов расчета, написание статьи)
9. Interplay of Bright Triplet and Dark Excitons Revealed by Magneto-Photoluminescence of Individual PbS/CdS Quantum Dots / Y. Kim, Z. Hu, I. D. Avdeev, A. Singh, A. Singh, V. Chandrasekaran, M. O. Nestoklon, S. V. Goupalov, et al. // *Small*. — 2021. — Vol. 17, no. 13. — P. 2006977. (Проведение численного моделирования, анализ экспериментальных данных, подготовка графиков)

Диссертация Авдеева И. Д. является законченным научным исследованием, вносящим значительный вклад в развитие теоретических методов исследования наносистем на основе многодолинных полупроводниковых материалов.

На заседании 23 декабря 2021 года диссертационный совет принял решение присудить Авдееву И. Д. ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3 - «Теоретическая физика».

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 20 человек, из них 7 докторов по специальности 01.04.02 - «Теоретическая физика», участвовавших в заседании, из 20 человек, входящих в состав совета, проголосовали за — 20, против – 0, воздержались – 0.

Председатель диссертационного совета,
Академик РАН

Сурис Роберт Арнольдович

Ученый секретарь
диссертационного совета,
доктор физико-математических наук

Сорокин Лев Михайлович

23 декабря 2021 г.