



ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ АКАДЕМИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

194021, Санкт-Петербург, ул. Хлопина, дом 8, корпус 3, литер А
Тел./факс: (812) 534-58-50 • www.spbau.ru

Отзыв

На автореферат диссертации А. В. Герта «МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ И ОПТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В КРЕМНИЕВЫХ НАНОСТРУКТУРАХ», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – «физика полупроводников»

Диссертация Герта Антона Владимировича посвящена моделированию кремниевых нанокристаллов и силицена с учетом роли поверхностных состояний. Актуальность данной работы объясняется важностью исследования влияния поверхности на оптоэлектронные свойства полупроводников и еще одной возможностью интеграции кремниевой наноэлектроники и оптоэлектроники.

В диссертации был построен эффективный гамильтониан силицена и изучено влияние электрического и магнитного полей на оптические свойства силицена. Электронная структура силицена была промоделирована на основе приближения сильной связи. Полученные результаты отличаются от результатов расчетов из первых принципов. Возможно, позволяют объяснить ряд различий между экспериментом и теорией. К сожалению, из текста автореферата не совсем ясно насколько велика роль двух подгоночных параметров в гамильтониане: смещения энергии p – орбиталей и разницы между энергиями p -орбиталей, лежащих в плоскости силицена и перпендикулярно ей. Однако в работе было показано, что слагаемые линейные по смещению подрешеток не вносят значительного вклада в спектр энергетических уровней Ландау, что подтверждает **научную новизну** полученных результатов. Так же в работе построена теоретическая модель автолокализованного состояния экситона на Si-O связи на поверхности кремниевого нанокристалла, которая позволяет объяснить отсутствие смещения полос фотолюминисценции кремниевых нанокристаллов при уменьшении их размера менее 2 нм, что без сомнения имеет **практическую ценность**.

Диссертантом выполнено серьезное и трудоемкое исследование включающее в себя численное и аналитическое моделирование, продемонстрировано умение пользоваться различными программными пакетами. Хотя в ряде случаев в автореферате происходит

смещение понятий моделирования из первых принципов и моделирования методом теории функционала плотности, судя по документации пакета Gaussian, они отличаются.

Результаты четко изложены в автореферате, даны ссылки на статьи в журналах из списка ВАК, где они были опубликованы. Однако при чтении автореферата, вызывает недоумение, почему при объяснении актуальности работы обсуждаются германиевые нанокристаллы, которые потом не упоминаются ни в целях и ни в задачах работы.

К недостаткам работы следует отнести отсутствие сравнения ряда расчетных результатов с экспериментальными данными, в частности размера энергетической щели для нанокристаллов кремния и германия, что не позволяет понять ограничения модели изложенной в разделе три.

Считаю, что диссертационная работа выполнена на высоком научном уровне и соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Герт Антон Владимирович, заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10.

В.н.с. лаборатории физики наноструктур

Академического университета, к. ф.-м. н.

Сибирев Н.В.