

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Козлова Глеба Геннадьевича
на тему: **ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЕ И ПРОСТРАНСТВЕННОЕ СТРОЕНИЕ
НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ТРАНСЛЯЦИОННО-НЕСИММЕТРИЧНЫХ
ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ СТРУКТУР**

на соискание ученой степени доктора физико-математических наук
по специальности 01.04.02 теоретическая физика

1. Актуальность избранной темы.

Диссертационная работа Козлова Г.Г. посвящена исследованию класса твердотельных решеточных моделей с узельным беспорядком для экситонов в мезоскопических системах, причем отсутствие трансляционной инвариантности выражается в неоднородности узельных расщеплений экситонных уровней. Такие решеточные модели возникают при исследовании электронного, экситонного, фононного, спинового движений в твердых телах. В случае трансляционно-симметричных систем решеточные гамильтонианы указанного типа диагонализуются переходом к представлению функций Блоха, однако, для ограниченных и случайных систем подобного универсального подхода не существует. Поэтому накопление информации о спектрах и характере собственных состояний для неупорядоченных систем остается актуальной проблемой. В диссертации показано, что решеточные гамильтонианы с диагональным беспорядком могут применяться как для описания систем, отсутствие трансляционной симметрии которых связано с их ограниченностью, так и для однородно-случайно разупорядоченных систем. В качестве основного математического объекта исследования в диссертации выступает гриновская функция или запаздывающий пропагатор матрицы гамильтониана. Такой язык является удобным для описания ограниченных систем, а для однородно-случайных систем, функция Грина является, возможно, единственным на сегодняшний день объектом, с помощью которого возможно исследовать энергетическую структуру и явления квантового переноса. При этом возникает необходимость вычислять средние значения функций Грина и их комбинаций, и методы такого усреднения, развиваемые в данной диссертационной работе, являются, несомненно, актуальными.

2. Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации. Достоверность и новизна исследования, полученных результатов, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации.

Основное оригинальное содержание диссертационной работы относится к исследованию спектральных и локализационных свойств одномерных случайных решеточных моделей экситона в твердотельных структурах, представленных в оригинальных главах 3 – 10. Автору удалось решить довольно старую проблему теоретической физики, сформулированную в основном еще в 1950-х годах, и получить ряд изящных оригинальных результатов по теории локализации квазичастиц и волн для ряда математических моделей неупорядоченных систем, относящихся к разнообразным отраслям современной физики.

Автор развивает подход, предложенный Фрименом Дайсоном в 1953, основанный на построении статистики гриновской функции неупорядоченной системы. Автор получает ряд новых оригинальных результатов для указанной статистики, на основе тщательной теоретической разработки проблемы, предлагая и развивая новые методы и подходы к их решению и детально сравнивая новые пути решения данных задач с известными опубликованными результатами, а также с результатами собственных численных экспериментов по моделированию неупорядоченных систем в качестве их про-

верки и апробации, что гарантирует достоверность результатов, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации автора. Полученные в работе результаты по расчету критерия локализации Андерсона потребовали обобщения метода Дайсона на случай совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина. В данном случае совместной статистики достоверность и обоснованность результатов и выводов автора гарантируются сравнением с компьютерными экспериментами, представленными в существенном объеме.

Все основные результаты диссертационной работы опубликованы в достаточном объеме в рецензируемых журналах, входящих в списки Web of Science, Scopus и РИНЦ.

3. Значимость для науки и практики полученных автором результатов.

В науке о твердотельных трансляционно-несимметричных системах имеется еще много открытых вопросов как научного, так и фундаментального характера. Вопрос о характеристике локализованных состояний является одним из них. Несмотря на то, что изучаемый в диссертационной работе критерий локализации Андерсона введен в теорию разупорядоченных систем довольно давно, методика его количественного расчета еще далека от завершения и в этом смысле развитый в диссертации метод совместной статистики гриновских функций является значимым.

В диссертации также проведено исследование нескольких новых классов моделей неупорядоченных систем, на основе которого получены новые существенные результаты. Результаты для экситонов на различных типах элементарных ячеек детально сравнивались с численными экспериментами, причем было достигнуто детальное согласие, что также подтверждает их значимость для науки и практики.

4. Конкретные рекомендации по использованию результатов и выводов диссертации.

Результаты и выводы диссертации представляют несомненный интерес, т.к. открывают новые пути и возможности для расчетов и интерпретации физических свойств волн и частиц в рамках целого класса моделей неоднородных и неупорядоченных систем. Хотя в диссертации решена сравнительно старая проблема теоретической физики - проблема локализации элементарных возбуждений и переходов типа металл-диэлектрик, - полученные результаты могут быть использованы как основа для изучения эффектов локализации в квазиодномерных структурах современной нанопизики, слоистых структурах, включая брэгговские зеркала, электронных и фотонных волноводах и стекловолокне, в устройствах обработки информации на основе электронных и оптических переключателей, смесителей, фильтров и интерферометров, без которых не мыслим дальнейший прогресс в современных нанотехнологиях, нано-оптоэлектронике и в разработке оптических и квантовых компьютеров.

5. Содержание и апробация диссертации

В качестве введения в теорию трансляционно-несимметричных твердотельных структур во Введении 0.1 и обзорной главе 0.2 диссертации представлены необходимые подготовительные материалы для основного содержания последующих глав. Это не обзор литературы, но скорее удачная краткая, но исчерпывающая, форма введения в тематику оригинальной части диссертационной работы с акцентом на наиболее интересные, по мнению автора, темы для изучения.

Во Введении 0.1 и обзорной главе 0.2 сформулирована модель Френкеля (1934) для экситона малого радиуса на дискретной решетке с узельным беспорядком и рассмо-

трены известные из цитированной литературы базовые сведения о процедурах усреднения по беспорядку решеточных пропагаторов и наблюдаемых экспериментально величин, таких как одночастичная запаздывающая гриновская функция экситона в неупорядоченной системе, спектр поглощения и плотность энергетических состояний, линейная восприимчивость, простая поляризационная петля в виде произведения запаздывающей и опережающей гриновских функций, временная динамика возбуждений и вероятность локализации на данном узле решетки и др. Разъясняется физический смысл введенных понятий и математических объектов теории, их связь с экспериментом, а также поясняется общность поставленной задачи по определению спектра протяженных и локализованных состояний, положения его границ в различных физически интересных неупорядоченных системах, которыми определяется транспорт фононов, электронов, экситонов, спиновых возбуждений в мезоскопических квазиодномерных каналах и волноводах, слоистых структурах, и некоторых приборных материалах. Установлена связь с теорией локализации Андерсона (1958) в современной формулировке, с характерным равномерным распределением вероятности узельного беспорядка, а также с точно решаемой моделью Ллойда (1969) для электронов и моделью Дайсона (1953) для фононов в неупорядоченных решетках. Основной упор сделан на детальном обсуждении результатов усреднения гриновской функции и более сложных объектов по распределению вероятности беспорядка, полученных методом Дайсона в его работе 1953 года и в последующих работах на эту тему.

В главе 0.3 впервые предложен и реализован метод дифференциального уравнения для некоторой величины, которая аналогична волновой функции экситона Френкеля в ограниченной диагонально разупорядоченной системе с гамильтонианом типа Андерсона (1958). Действительно, эта величина является просуммированной по второму аргументу гриновской функцией экситона. Для такой волновой функции возможно построить приближение непрерывной эффективной среды или, что эквивалентно, приближение молекулярного поля, в котором эффективная среда заменяет в усредненном смысле диагонально разупорядоченную дискретную атомную решетку. Решения полученного автором дифференциального уравнения для экситона в такой эффективной среде должны быть справедливы в длинноволновом приближении, что автор продемонстрировал конкретными вычислениями и моделированием.

Найдены решения для модели конечной одномерной цепочки, цепочки со скачком атомного расщепления и для задачи о трехмерном сферическом кластере. Во всех этих случаях методом дифференциального уравнения для гриновской функции удалось получить аналитические выражения для спектра поглощения. Автор приводит сравнение теоретических результатов с данными, полученными компьютерным численным моделированием, показывающее хорошее соответствие, и указывает на возможность использования полученных соотношений для интерпретации экспериментов по спектроскопии J-агрегатов и квантовых точек.

В следующих разделах главы 0.3 найдена гриновская функция кристаллического слоя, рассмотрено рассеяние в области экситонного резонанса - антизеркальное отражение. Автор использовал метод предложенного дифференциального уравнения для расчета длинноволновых компонент гриновской функции, которые необходимы для расчета нелокальной восприимчивости, и предложил вариант решения классической задачи о прохождении света через кристаллическую пластинку при наличии большой пространственной дисперсии. Существенно, что в предложенном подходе амплитуда добавочной волны Пекара последовательно вычисляется в процессе решения нелокальных уравнений Максвелла.

В главе 0.4 диссертационной работы представлены новые подходы и результаты изучения бесконечных разупорядоченных одномерных систем. В начале данной главы автор сформулировал новую модель одномерной диагонально разупорядоченной цепочки с гиперболическими дефектами, для которой в работе получено выражение для

спектра поглощения. При этом применялся метод дифференциального уравнения для гриновской функции, предложенный в главе 0.3.

Последующие разделы главы 0.4 посвящены развитию метода усреднения Дайсона (1953), который ориентирован на одномерные системы с взаимодействием ближайшего соседа, причем исследуется функция распределения краевой гриновской функции (автор называет эту функцию распределения статистикой). Исследовано интегральное уравнение Дайсона типа Фредгольма для указанной статистики при бинарном (сплав) и равномерном (модель Андерсона) диагональном беспорядках. Для бинарного случая автор показал, что функция распределения имеет фрактальный характер и указал алгоритм последовательного дробления области определения, позволяющий вычислить статистику гриновской функции с любой точностью и аналитически продолжить получаемые с ее помощью усредненные функции Грина на область спектра. Приводятся примеры вычисления плотности состояний на краевом узле. Для случая равномерно беспорядка автор указывает интервал области определения, где статистика может быть точно вычислена, и предлагает процедуру, позволяющую вычислить статистику в дополнительной области. Для случая равномерно разупорядоченной задачи приводится расчет усредненной краевой функции Грина и границ спектра. В заключении главы 0.4 приводится полученное автором точное решение для коррелированной модели Ллойда. В этом случае удалось получить аналитические выражения для плотности состояний для случаев взаимодействия с ближайшими соседями и экспоненциального взаимодействия.

В главе 0.5 изучается долговременная асимптотика динамики распада первоначально локализованного возбуждения в одномерной диагонально разупорядоченной системе. Для вычисления этой динамики автор обобщает метод Дайсона на случай совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина и разрабатывает метод решения получающегося для этой статистики уравнения. С помощью разработанного метода вычисляются долговременные асимптотики плотности возбуждения на краевом узле для случаев бинарно разупорядоченной цепочки и цепочки с малым беспорядком общего вида.

В главе 0.5 предложен новый метод разложения совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина по полной ортонормированной с весом системе функций, которые по существу являются специальными функциями нового типа и могут составить новый раздел в функциональных методах математической физики.

Как показано в главе 0.5 и ниже в главе 0.8, введенное автором представление о функции участия оказывается исключительно полезным для наглядного представления физических свойств неупорядоченных моделей типа Андерсона в терминах среднего радиуса локализации, зависящего от энергии экситона относительно центра разрешенной энергетической зоны. Например, результаты рис. 22 на стр. 132 иллюстрирует данное положение и показывает нетривиальную связь между указанными параметрами, что выражается в предпочтительной делокализации состояний экситона вблизи краев зоны - факт, неочевидный с интуитивной точки.

В главе 0.6 использован развитый метод главы 0.5 совместной статистики функций Грина для анализа локализации в системе со сложной структурной единицей. Автор показал, что в такой системе возникают «точки делокализации», в которых функция участия обращается в нуль. Материал этой главы имеет качественно много общего с материалом главы 0.8, где предложенный автором метод совместной статистики применяется для непрерывной модели с кусочно-постоянным случайным потенциалом.

В главе 0.7 предлагаемый метод анализа локализации распространяется на случай разупорядоченных систем, у которых случайный потенциал не имеет конечной дисперсии, например, модель Ллойда. При этом показано, что зависимость остаточной плотности возбуждений на краевом узле от степени разупорядочения становится линей-

ной. Следует отметить, что для потенциалов с конечной дисперсией эта зависимость квадратичная, см. главу 0.5.

Глава 0.8 посвящена одномерным кусочно-постоянным потенциалам. Показано, что метод совместной статистики позволяет для целого семейства моделей вычислить остаточную плотность возбуждений и ее спектральную зависимость, а также длину локализации, которая имеет более наглядный физический смысл, см. материалы главы 0.5.

В главе 0.9 исследуются коррелированные системы и показано, что разрабатываемый автором метод совместной статистики может быть применен и в этом случае, причем параметром малости служит обратный радиус корреляции случайного потенциала.

В главе 0.10 диссертации автор предлагает новый метод манипуляции диаграммами функции Грина - метод следящих операторов, - позволяющий домножать диаграммы на факторы, зависящие от вида диаграммы. Приводятся примеры решения известных в теории разупорядоченных систем задач, иллюстрирующие предлагаемый метод. Затем развитый метод используется для анализа нестационарного случайного процесса, возникающего при построении 0-состояния одномерной цепочки при бинарном недиагональном беспорядке. При этом автор вводит особую меру локализации этого состояния - число узлов, накрываемых волновой функцией, в смысле Андерсона-Таулеса - и приводит формулу для его расчета. Формула получается путем сопоставления диаграмм функции Грина некоторой специально построенной матрицы реализациям 0-состояния и применению метода следящих операторов. Показано, что 0-состояние всегда накрывает конечное число узлов при любом отличном от нуля уровне беспорядка.

6. Достоинства и недостатки в содержании и оформлении диссертации, оценка научной работы соискателя в целом.

К основным достоинствам данной диссертационной работы можно отнести следующие.

Предложенный в диссертации метод дифференциального уравнения как приближение эффективной среды главы 0.3 имеет несколько аналогов в различных разделах теоретической физики, включая газ Ван-дер-Ваальса, молекулярное поле Вейсса в ферромагнетике, параметры порядка в макроскопических квантовых явлениях сверхпроводимости и сверхтекучести, исключенный объем в случайных блужданиях без самопересечений и конформации полимерных цепей, теории сложных растворов и т.д., но в теории конечных трансляционно несимметричных твердотельных структур такой подход появился впервые. Ближайшим родственником данного подхода является метод огибающей волновой функции для электронов и дырок проводимости в наномасштабных гетероструктурах и сверхрешетках.

Заметим, что метод когерентного потенциала для сплавов, как и метод оптического потенциала Ферми для атомных ядер, основан на другой идее - отсутствия рассеяния в среднем, что в принципе отличает их от приближения эффективной среды в данной диссертации в указанном выше смысле.

Начиная с главы 0.4, автор излагает собственный нетрадиционный подход к исследованию одномерных неупорядоченных систем и свои наиболее впечатляющие результаты. Суть состоит в том, что автор не только выписывает интегральные уравнения метода Дайсона, что часто делается в других публикациях для полноты физической картины, но автор смело приступает к решению этих уравнений и действительно их решает, изобретательно применяя для этого разнообразную математическую технику, интуицию и большое мастерство. Автор достигает в этой активности колоссального прогресса. Кажется даже удивительным, что представленные здесь и далее результаты были до сих пор неизвестны, хотя в диссертации решена довольно старая проблема те-

рии локализации. Ведь в своей основополагающей работе Дайсон (1953) не решил проблему диагонального беспорядка, которая и была последовательно рассмотрена и решена в данной диссертации методом Дайсона. Последующая работа по диагональному беспорядку в мире была сосредоточена не на решении интегральных уравнений Дайсона, общего метода решения которых до сих пор не существовало даже для одномерных систем, а на других аспектах теории локализации Андерсона - исследовании сходимости рядов теории возмущений по прыжковому интегралу, попытках их просуммировать в среднем или найти мажорирующие последовательности, поисках различных самосогласованных решений, развитию метода ренормгруппы и др. Приходится признать, что все эти достижения делают данную диссертацию очень заметной даже на докторском уровне - предложен новый теоретический метод решения уравнений Дайсона, см. ниже, и решена нерешенная до сих пор старая проблема одномерных неупорядоченных систем, найден путь для обобщения существующей теории. Теория не перестала быть сложной, но автор проложил тонкую тропинку в непроходимых до сих пор дебрях и наметил новые пути.

В главе 0.5 автору во всех физически интересных случаях удалось найти первое неиз исчезающее приближение для проблемы локализации Андерсона для одномерной системы, что является исключительно важным новым результатом теории. Для характеристики степени локализации собственных функций задачи автор вводит функции участия, для которых также приводятся аналитические выражения для упомянутых выше случаев разупорядоченных систем.

В главе 0.5 предложен новый метод разложения совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина по полной ортонормированной с весом системе функций, которые по существу являются специальными функциями нового типа и могут составить новый раздел в функциональных методах математической физики.

Как показано в главе 0.5 и ниже в главе 0.8, введенное автором представление о функции участия оказывается исключительно полезным для наглядного представления физических свойств неупорядоченных моделей типа Андерсона в терминах среднего радиуса локализации, зависящего от энергии экситона относительно центра разрешенной энергетической зоны. Например, результаты рис. 22 на стр. 132 иллюстрирует данное положение и показывает нетривиальную связь между указанными параметрами, что выражается в предпочтительной делокализации состояний экситона вблизи краев зоны - факт, неочевидный с интуитивной точки.

В главе 0.10 предложен новый метод манипуляции диаграммами функции Грина - метод следящих операторов, - позволяющий исследовать 0-состояние одномерной цепочки при недиагональном беспорядке и получить точную формулу для количества узлов решетки, накрываемых этим состоянием.

К замечаниям по данной диссертационной работе относятся следующие.

В качестве первого замечания к материалу Введения 0.1 и обзорной главы 0.2 необходимо отметить отсутствие ссылок в списке литературы диссертации на некоторые старые и новые обзорные и оригинальные публикации по теории неупорядоченных систем. Например, представляется разумным хотя бы упомянуть существенные результаты по теории квантового движения в непрерывном случайном потенциале, а также развитие теории локализации Андерсона, в частности, его сотрудниками и другими авторами:

R. Abou-Chacra, P. W. Anderson, D. J. Thouless, J. Phys. C, **6**, p. 1734, (1973).

R. Abou-Chacra, D. J. Thouless, J. Phys. C, **7**, p. 65, (1974).

K. Ishii, Prog. Theor. Phys., Suppl., **53**, p. 77, (1973)

В. Л. Бонч-Бруевич, И. П. Звягин, Р. Кайпер, А.Г. Миронов, Р. Эндерлайн, Б. Эссер, *Электронная теория неупорядоченных полупроводников*, Москва «Наука», (1981).

Второе замечание касается формулы (88) главы 0.2 и последующего за ней вывода о совпадении точного результата модели Ллойда (1969), представленного выведенными в этой же главе уравнениями (51) и (52), с выражением (88). Автору следует быть здесь более осторожным, т.к. выражение (88) является лишь частным случаем модели Ллойда (1969) в так называемом самосогласованном приближении и не совпадает с результатом (51)-(52), см., например, обсуждение в цитированных выше работах Abou-Chacra 1973 1974 и Thouless 1974. В точный результат Ллойда (1969) обязательно входит кристаллический закон дисперсии, который отсутствует в формуле (88).

Возможно, правильное место раздела 0.4.1 должно быть в главе 0.3, посвященной подходу на основе дифференциального уравнения. .

В качестве замечания по главе 0.5 следует отметить отсутствие общего анализа сходимости процедуры разложения совместной статистики по малому параметру разложения.

В качестве замечания по главе 0.6 отметим, что остается неясной природа аномалии в центре зоны при численном моделировании, см. рис. 24 на стр. 164, - является ли это результатом принятой процедуры расчета или это какая-то внутренняя, присущая данной рассматриваемой неупорядоченной системе особенность, требующая дальнейшего исследования.

Замечено несколько несущественных опечаток. Все вышеперечисленные замечания, однако, несущественны для общей положительной оценки диссертации в целом.

7. Заключение о соответствии диссертации критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней.

Представленные в диссертации Козлова Г.Г. результаты имеют важное значение для теоретической физики конечных и бесконечных разупорядоченных систем.

Основное оригинальное содержание диссертационной работы относится к исследованию спектральных и локализационных свойств одномерных случайных решеточных моделей экситона в твердотельных структурах, представленных в оригинальных главах 3 – 10. Автору удалось решить старую нерешенную проблему теоретической физики, сформулированную в основном еще в 1950-х годах, и получить ряд изящных оригинальных результатов по теории локализации квазичастиц и волн для ряда математических моделей неупорядоченных систем, относящихся к разнообразным отраслям современной физики.

Автор развивает подход, предложенный Фрименом Дайсоном в 1953, основанный на построении статистики гриновской функции неупорядоченной системы. Автор получил ряд новых оригинальных результатов для указанной статистики, на основе тщательной теоретической разработки проблемы, предлагая и развивая новые методы и подходы к их решению и детально сравнивая новые пути решения данных задач с известными опубликованными результатами, а также с результатами собственных численных экспериментов по моделированию неупорядоченных систем в качестве их проверки и апробации, что гарантирует достоверность результатов, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации. Предложено и апробировано обобщение метода Дайсона на случай совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина, что является абсолютно первым достижением такого рода в теории локализации.

Результаты и выводы диссертации представляют несомненный интерес, т.к. открывают новые пути и возможности для расчетов и интерпретации физических свойств волн и частиц в рамках целого класса моделей неоднородных и неупорядоченных систем. Полученные результаты могут быть использованы как основа для изучения эффектов локализации в квазиодномерных структурах современной нанофизики, слоистых структурах, включая брэгговские зеркала, электронных и фотонных волноводах и

стекловолокне, в устройствах обработки информации на основе электронных и оптических переключателей, смесителей, фильтров и интерферометров, без которых не мыслим дальнейший прогресс в современных нанотехнологиях и в разработке оптических и квантовых компьютеров.

Все основные результаты диссертационной работы опубликованы в достаточном объеме в рецензируемых журналах, входящих в списки Web of Science, Scopus и РИНЦ. Количество публикаций по теме диссертации - 12, полное число публикаций автора, включая обзор в УФН, 1999, т.169, с. 909 - 49. Полное количество цитирований - 200, h-индекс - 9. Козлов Г.Г. является не только высококвалифицированным физиком в теории разупорядоченных низкоразмерных структур, но и в области магнитооптических эффектов (обзор в УФН). Он также автор работ по шумовой спектроскопии спиновых систем и медленному свету.

Таким образом, диссертация Козлова Г.Г. на соискание ученой степени доктора наук является законченной научно-квалификационной работой отвечает требованиям п. 9 Положения «О порядке присуждения ученых степеней» №842, а ее автор Козлов Глеб Геннадьевич заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.02 – «Теоретическая физика».

Официальный оппонент,
Владимир Александрович Машков
профессор, доктор физ.-мат. наук, ст.н.с.

В. А. Машков

Санкт-Петербургский государственный
политехнический университет Петра Великого
195251, Санкт-Петербург,
Институт физики, нанотехнологий и телекоммуникаций
Политехническая ул., 29
тел. (812) 552-77-90
vladmashkov@yahoo.com