



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное автономное
образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский политехнический
университет Петра Великого»
(ФГАОУ ВО «СПбПУ»)

**ИНН 7804040077, ОГРН 1027802505279,
ОКПО 02068574**

Политехническая ул., 29, С.-Петербург, 195251
Телефон (812) 297-20-95, факс 552-60-80
E-mail: office@spbstu.ru

_____ № _____

на № _____ от _____

┌ _____
отзыв ведущей организации
└ _____

«УТВЕРЖДАЮ»
Проректор
по научной работе

Виталий Владимирович Сергеев

« ____ » января 2017 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертацию Герта Антона Владимировича «Моделирование электронных состояний и оптических процессов в кремниевых наноструктурах», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 — Физика полупроводников.

Диссертационная работа А.В. Герта посвящена развитию теоретических методов исследования двумерных и нуль-мерных кремниевых наноструктур.

Актуальность темы диссертации связана с потенциальными оптическими применениями кремниевых нанокристаллов, в которых ожидается увеличение вероятности излучательной рекомбинации по сравнению с объемным непрямозонным кремнием за счет неопределенности волнового вектора электрона. Отдельного интереса со стороны исследователей в настоящее время заслуживает силицен, на основе которого прогнозируется разработка новых электронных приборов.

Несмотря на то, что в современной физике полупроводников активно развивается исследование кремниевых наноструктур, некоторые вопросы в этой области остаются открытыми. Так, ряд особенностей в экспериментально наблюдаемых спектрах фотолюминесценции кремниевых нанокристаллов, в том числе и в кинетике горячей фотолюминесценции, а также данные время-разрешенной pump-probe спектроскопии оптического поглощения кремниевых нанокристаллов, требуют детального теоретического описания процессов энергетической релаксации носителей заряда, определения механизмов и параметров таких процессов.

В работе А.В. Герта проводится последовательное теоретическое описание механизмов излучательной и безызлучательной рекомбинации, а также кинетики неравновесных носителей заряда в суб-наносекундном диапазоне, с учетом поверхностных состояний кремниевых нанокристаллов. Далее, проводятся расчеты зонной структуры нанокристаллов и силицена в рамках метода сильной связи с учетом отличия постоянных решетки от соответствующих величин для объемных материалов. Кроме того, для силицена путем симметричного анализа построен эффективный гамильтониан, описывающий спектр вблизи дираковской точки, и определены его параметры.

Диссертация имеет структуру, соответствующую рекомендациям ВАК, и состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и двух приложений, в которые вынесены громоздкие математические выкладки. Содержание диссертационной работы изложено на 93 страницах текста, включая 22 рисунка, 9 таблиц и список из 64 библиографических ссылок на оригинальные работы других авторов.

Во введении обоснована актуальность темы исследований, сформулированы цель и научная новизна работы, перечислены основные положения, выносимые на защиту. Первая глава посвящена описанию феноменологической модели экситона, автолокализованного на поверхности нанокристалла, разработке теоретической модели многофононной и излучательной рекомбинации автолокализованного экситона и расчетам вероятностей этих процессов и спектров рекомбинационного излучения автолокализованных экситонов.

Во второй главе рассмотрены механизмы релаксации энергии горячих носителей заряда с участием автолокализованных поверхностных состояний в суб-наносекундном диапазоне и приведены результаты Монте-Карло моделирования распределения носителей по энергиям, хорошо согласующиеся с экспериментально наблюдаемыми в кинетике рекомбинационного излучения широкими спектрами фотолюминесценции.

В третьей главе представлены результаты моделирования энергетического спектра носителей заряда в кремниевых и германиевых нанокристаллах методом сильной связи с учетом отличия постоянных решетки от соответствующих значений для объемных материалов, а также рассчитаны сечения поглощения для «прямых» оптических межзонных переходов.

Четвертая глава посвящена построению эффективного гамильтониана силицена, в том числе и в электрическом и магнитном полях, и расчету его параметров методом сильной связи.

В заключении сформулированы основные результаты, полученные в диссертации.

К числу наиболее важных результатов, имеющих научную новизну, можно отнести следующие:

- Построена теоретическая модель многофононной и излучательной рекомбинации экситона, автолокализованного на поверхности нанокристалла кремния.

- Предложен механизм релаксации горячих носителей заряда в нанокристаллах кремния на основе эффективного туннельного обмена между поверхностными и «объемными» состояниями, показан его доминирующий вклад в кинетику рекомбинационного излучения в суб-наносекундном диапазоне.

- Изучено влияние изменения кристаллической решетки нанокристаллов кремния и германия за счет ограничения размера на их энергетический спектр и оптические свойства.

- Построен эффективный гамильтониан силицена и определены его параметры методом сильной связи.

Достоверность научных результатов и выводов работы обеспечивается применением современных методов теоретического анализа и численных расчетов.

Практическая ценность заключается в том, что разработанные теоретические модели рекомбинации и релаксации носителей заряда с участием поверхностных состояний кремниевых нанокристаллов позволяют объяснить экспериментальные данные. Определены параметры эффективного гамильтониана силицена вблизи дираковской точки.

Результаты работы можно рекомендовать для использования в научных и учебных организациях, в которых ведутся исследования по сходной тематике: в Институте физики микроструктур РАН, Санкт-Петербургском государственном университете, Московском государственном университете им. В.М. Ломоносова, Институте физики твердого тела РАН, а также в других вузах и научно-исследовательских институтах.

По диссертации имеются следующие замечания.

1. По результатам Главы 1 рассчитанный спектр рекомбинационного излучения из автолокализованного состояния лежит в средней ИК области (энергия кванта вблизи 0.3 эВ). При сравнении же этого результата с экспериментальными данными (стр. 27) приводятся ссылки на работы, в которых фотолюминесценция наблюдалась в ближней ИК области (энергия кванта вблизи 0.8 эВ). При этом автор никак не комментирует 167%-ное отклонение теории и эксперимента.

2. В первых двух главах, при описании излучательных свойств нанокристаллов, автор рассматривает экситоны, что подразумевает учет кулоновского взаимодействия. Однако в третьей главе для расчета спектра поглощения используется одноэлектронное приближение метода сильной связи. При этом в работе не отражено, насколько правомерно такое приближение.

3. Влияние подложки на электронную структуру силицена учитывалось опосредовано, через зависимость величины смещения подрешеток в направлении, перпендикулярном плоскости силицена, при этом численные значения параметров гамильтониана приведены для смещения, соответствующего свободной пленке силицена, а не реальным структурам на его основе.

4. Замечание технического плана: в тексте работы обнаружено 45 опечаток.

Сделанные замечания не носят принципиального характера и не снижают общей положительной оценки диссертационной работы.

Результаты работы полностью и своевременно опубликованы в ведущих рецензируемых научных изданиях, рекомендуемых ВАК РФ, прошли апробацию в форме докладов и обсуждений на российских и международных конференциях и семинарах. Автореферат правильно и полностью отражает содержание диссертации.

Таким образом, диссертационная работа «Моделирование электронных состояний и оптических процессов в кремниевых наноструктурах» является законченным научным исследованием, соответствует профилю Совета Д 002.205.02 (специальность 01.04.10 – физика полупроводников), полностью отвечает требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 01.04.10 — физика полупроводников, а её автор Герт Антон Владимирович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертационная работа А.В. Герта заслушана и обсуждена на научном семинаре кафедры "Физика полупроводников и наноэлектроника" института физики, нанотехнологий и телекоммуникаций федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет» 19 января 2017.

Отзыв заслушан и утвержден на заседании кафедры "Физика полупроводников и наноэлектроника" 19 января 2017 г., протокол № 5.

Доцент кафедры "Физика
полупроводников и наноэлектроника",
кандидат физико-математических наук
тел. +7 (812) 552 96 71
e-mail: sofronov@rphf.spbstu.ru

Антон Николаевич Софронов

Заведующий кафедрой
"Физика полупроводников и наноэлектроника",
профессор, доктор физико-математических наук
тел. +7 (812) 552 96 71
e-mail: dmfir@rphf.spbstu.ru

Дмитрий Анатольевич Фирсов