

## ОТЗЫВ

официального оппонента Бурдова Владимира Анатольевича, доктора физико-математических наук, доцента, профессора кафедры теоретической физики Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского» (адрес: 603950, Нижний Новгород, пр. Гагарина 23; телефон: +7 831 4623304; e-mail: [burdov@phys.unn.ru](mailto:burdov@phys.unn.ru))

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

В диссертации Антона Владимировича Герта теоретически изучаются вопросы, связанные с электронным строением кремниевых нанокристаллов и силицена, а также с излучательной и безызлучательной релаксацией экситонов в нанокристаллах кремния. В частности, автором исследуется вклад так называемых самозахваченных – автолокализованных на поверхности нанокристалла – экситонов в общую релаксационную динамику нанокристалла кремния (главы 1, 2); изучается воздействие напряжений, обусловленных конечным размером кристаллита, на его электронную структуру и скорости межзонной излучательной бесфононной рекомбинации (глава 3); рассчитываются параметры зонной структуры и квантовые состояния в силицене, как в отсутствие, так и при наличии внешних полей (глава 4).

На протяжении последних двух с половиной десятилетий наноструктурированный кремний являлся, и продолжает оставаться сейчас, объектом интенсивных исследований экспериментального и теоретического характера. Как в отечественной, так и в зарубежной научной печати регулярно появляются публикации, посвященные исследованиям электронных и оптических свойств нанокристаллов кремния. К настоящему времени уже не вызывает сомнения тот факт, что важную роль в различных электронных явлениях, происходящих в кремниевых нанокристаллах (особенно малых размеров – порядка одного-двух нанометров), играет поверхность. В частности, активно изучаются нанокристаллы с поверхностью, пассивированной различными химическими элементами или цепочками элементов, исследуется роль дефектов, образующихся на поверхности, рассматриваются нанокристаллы, встроенные в какие-либо широкозонные матрицы (чаще всего, в матрицу диоксида кремния), с точки зрения влияния этих факторов на электронную структуру нанокристаллов, а также на излучательные и безызлучательные переходы в них. При этом, без преувеличения можно сказать, что особое место в этих исследованиях (просто в силу естественности своего возникновения) занимают нанокристаллы, на поверхности которых существуют кремний-

кислородные (Si-O) связи различных типов. Как правило, наличие кислородных дефектов приводит к сильному уменьшению ширины оптической щели нанокристалла и ослабляет его излучательную способность. Одна из задач представленной диссертации состояла в моделировании релаксационной динамики экситонов в кремниевых нанокристаллах при наличии Si-O связи на поверхности, что в полной мере отвечает современным направлениям исследований в этой области.

В последние годы возник и привлекает большое внимание исследователей новый низкоразмерный объект – силицен, представляющий собой монослой атомов кремния. В определенном смысле, силицен является аналогом графена, однако между этими системами есть и принципиальная разница. В силицене, в отличие от графена, формируется щель в спектре, обусловленная более сильным спин-орбитальным взаимодействием. В диссертации на основе метода сильной связи выполнены расчеты параметров  $kp$ -гамильтониана вблизи щели для свободного силицена, а также и в присутствии электрического и магнитного полей, что позволяет использовать полученный  $kp$ -гамильтониан при решении различных задач. На мой взгляд, полученные автором результаты представляют интерес для физики полупроводников. В свете сказанного, **актуальность** проведенных в работе исследований представляется несомненной.

Традиционно, кремний рассматривается (и давно уже таковым является) как основной материал микро- и нанoeлектроники. Вместе с тем, нанокристаллический кремний, помимо привычных «кремниевых» приложений, все чаще выступает в качестве многообещающего кандидата для его использования в других областях – таких как фотоника, фотовольтаика, биология, медицина, и некоторых других. Естественно, продвижение кремниевых наноструктур в ту или иную сферу человеческой жизнедеятельности требует основательной предварительной проработки (как теоретической, так и экспериментальной) широкого круга вопросов, связанных с различными физическими свойствами данных объектов. В этой связи, моделирование электронной структуры и процессов энергетической релаксации в кремниевых наноструктурах, предпринятое в работе А.В. Герта, является **практически значимым** научным исследованием.

Диссертационная работа А.В. Герта обладает научной **новизной**. Некоторые результаты были получены им **впервые**. В частности:

1) Найдены вероятности «возврата» автолокализованного на Si-O связи экситона в нанокристалл кремния и рассчитаны спектры излучения, возникающего при рекомбинации автолокализованного экситона.

2) Построена модель энергетической релаксации высоковозбужденных (горячих) экситонов в нанокристаллах кремния при наличии Si-O дефекта на поверхности и определены характерные времена релаксации.

3) В рамках модели сильной связи определены скорости излучательных электронно-дырочных переходов и сечение поглощения в кремниевых нанокристаллах, пассивированных водородом, с учетом деформации кристаллической решетки, вызванной конечностью размера нанокристаллов.

Научные положения, сформулированные в работе, физически *обоснованы*. Они имеют наглядную и понятную физическую интерпретацию и базируются на умении автора решать как аналитически, так и численно различные задачи квантовой физики, теории излучения, физической кинетики. Автор использует как хорошо известные и апробированные методы исследования квантовых систем, так и оригинальные методы расчета. В частности, автором используется метод сильной связи, позволяющий описывать нанокристаллы в широком диапазоне размеров. Другим хорошо известным методом, часто используемым для расчета вероятностей различных квантовых переходов, который применяется и в диссертации, является «золотое правило Ферми». Используются также и оригинальные методы компьютерного моделирования. Автором были осмыслены и проанализированы подходы и приближения, применявшиеся ранее другими исследователями при решении похожих задач, и проработана литература по исследуемым и смежным вопросам.

Результаты, полученные в работе, являются *достоверными*. Их достоверность подтверждается, в частности, внутренней непротиворечивостью и разумными числовыми значениями рассчитываемых параметров и характеристик – таких как, например, энергии переходов или скорости различных релаксационных процессов, которые рассчитывались и другими авторами для систем, близких к рассматриваемым в диссертации. При моделировании релаксационной динамики в нанокристаллах многие «входные» параметры, закладываемые в модель, брались непосредственно из экспериментов.

Полученные А.В. Гертом результаты известны научной общественности. Они докладывались на российских и международных конференциях и совещаниях и были опубликованы в ведущих отечественных и зарубежных научных журналах. Все это свидетельствует о высокой компетентности автора в области физики полупроводников и полупроводниковых структур, в частности.

В целом, диссертация производит благоприятное впечатление. Однако при знакомстве с работой обращают на себя внимание некоторые недочеты, допущенные автором при написании. В частности:

1. В главах 1, 2 рассматривается автолокализованный экситон и делается попытка анализа различных излучательных и безызлучательных переходов с его участием. Однако никаких собственных расчетных данных о волновых функциях электрона и дырки, образующих экситон, которые, как раз, и позволили бы найти вероятности квантовых переходов, в работе нет. Казалось бы, владея методом сильной связи, можно было рассчитать волновые функции носителей как для автолокализованного экситона, так и для других экситонных состояний и продемонстрировать их локализацию на кислородной связи или, наоборот, в объеме нанокристалла (и тем самым подтвердить существование автолокализованного экситона и иных возбужденных состояний в системе). Вместо этого, для моделирования берутся значения требуемых параметров, определенные, зачастую, каким-либо косвенным образом из многочисленных

работ других авторов. Иногда, некоторые параметры – например, матричные элементы переходов, которые можно было бы вычислить напрямую – объявляются подгоночными. В результате таких многоступенчатых перерасчетов можно накопить достаточно большую ошибку.

2. В главе 2 моделируется безызлучательная релаксация сильно возбужденных (горячих) экситонов. При этом, по сути, рассматриваются два канала – релаксация через фононную подсистему нанокристалла и через колебательные моды Si-O дефекта. Вероятность однофононного испускания в первом процессе принята в работе (эти вероятности тоже, конечно, лучше бы было рассчитать) на порядок большей, чем во втором ( $5 \times 10^{11} \text{ с}^{-1}$  и  $5 \times 10^{10} \text{ с}^{-1}$  соответственно). Допускается также с некоторой вероятностью процесс перехода экситона «из нанокристалла на поверхностный дефект» и обратно. В результате моделирования методом Монте-Карло получается характерное время релаксации горячего экситона в низшее состояние порядка  $10^{10}$  с. Автор утверждает при этом, что релаксация идет за счет интенсивных переходов экситона из автолокализованного поверхностного состояния в «нормальное» состояние в нанокристалле и обратно. Представляется, однако, что при выбранных вероятностях однофононной релаксации, системе вообще «не нужны» будут переходы в автолокализованное состояние с колеблющимся Si-O дефектом. Высвобождение лишней энергии произойдет гораздо быстрее, если релаксировать напрямую через фононную подсистему нанокристалла. При этом, на совершение 10-15 однофононных переходов (показанных на рисунке 6) как раз и понадобится полученное автором время – по крайней мере, этого вполне естественно ожидать. Таким образом представляется, что релаксация горячих экситонов вообще не будет зависеть в этом случае от наличия Si-O связи.

3. Не вполне понятно, почему, когда речь идет о захвате экситона на Si-O связь или об обратном переходе (с.22-23 и далее), говорится о термостимулированном туннелировании. Ведь нанокристалл и дефект образуют единую систему – атом кремния принадлежит и нанокристаллу и дефекту. Можно ли в этом случае говорить о туннелировании, и почему оно является термостимулированным даже в том случае, когда система в результате перехода понижает энергию (рисунок 4)? Ведь вероятность этого процесса отлична от нуля и при нулевой температуре.

4. В главе 3 в рамках модели сильной связи производится расчет электронной структуры, скоростей излучательных переходов и сечения поглощения кремниевых нанокристаллов с размерами 1.8, 2.5 и 3.6 нм. На рисунке 11 представлена плотность состояний для релаксированных и нерелаксированных кристаллитов. Как видно из рисунка, основное состояние валентной зоны для всех нерелаксированных кристаллитов вырождено четырехкратно – как и должно быть – ведь оно порождается латтинжеровским квадруплетом зоны легких и тяжелых дырок объемного кристалла. Вместе с тем, для релаксированного кристаллита с размером 1.8 нм основное состояние оказывается вырожденным только двукратно. Деформация настолько сильно влияет на спектр кристаллита?

5. Не слишком удачен рисунок 15. Если автор ставил целью сопоставить скорости излучательных переходов в релаксированном и нерелаксированном нанокристаллах, то по рисунку 15 такое сравнение провести затруднительно. К сожалению, в тексте диссертации об этом сравнении тоже ничего не сказано. Хотя какой-то вывод из проделанных расчетов сделать, все-таки, нужно.

6. В главе 4 на основе модели сильной связи рассчитывается зонная структура силицена и параметры  $kp$ -гамильтониана, а также дано решение задачи об электронных состояниях в силиcene в поперечном магнитном поле. При расчетах автор, как следует из текста диссертации, для определения параметров модели, старался максимально приблизить получаемые дисперсионные кривые к тем, которые получаются из первопринципных расчетов (ссылка [55]). Известно, однако, что теория функционала плотности не слишком хорошо описывает возбужденные состояния системы, существенно занижая, в частности, ширину энергетической щели. Возможно, полученная в диссертации в результате такой подгонки щель будет слишком малой?

Высказанные выше замечания, тем не менее, не снижают общей достаточно высокой оценки научного уровня диссертационной работы. Автором была избрана актуальная тема диссертации, полученные результаты обладают практической ценностью и научной новизной. Работа представляет собой законченное научное исследование. Структура и содержание диссертации соответствуют целям и задачам исследования. Автореферат полностью отражает содержание диссертации. Полагаю, таким образом, что диссертационная работа А.В. Герта «Моделирование электронных состояний и оптических процессов в кремниевых наноструктурах» в полной мере отвечает требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, в том числе критериям II-го раздела Положения о присуждении учёных степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842, а ее автор, Герт Антон Владимирович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников.

Профессор кафедры теоретической физики  
ННГУ им. Н.И. Лобачевского  
доктор физико-математических наук

В.А. Бурдов

Подпись В.А. Бурдова заверяю:  
Ученый секретарь  
ННГУ им. Н.И. Лобачевского  
кандидат социологических наук

Л.Ю. Черноморская

31 января 2017