

«УТВЕРЖДАЮ»

Директор
Федерального государственного
бюджетного учреждения науки
Институт физики полупроводников
им. А.В. Ржанова Сибирского отделения
Российской академии наук
академик, д.ф.-м.н. Латышев А.В.

«___» _____ 2017 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации – федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова» Сибирского отделения Российской академии наук на диссертацию НЕСТОКЛОНА Михаила Олеговича «ЭФФЕКТЫ АТОМАРНОЙ СТРУКТУРЫ ИНТЕРФЕЙСОВ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОСИСТЕМАХ»,

представленную в диссертационный совет № Д 002.205.02 при Физико-техническом институте им. А.Ф.Иоффе РАН на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников.

Диссертация М.О. Нестоклона «Эффекты атомарной структуры интерфейсов в полупроводниковых наносистемах» представляет собой завершённое теоретическое исследование роли идеальных интерфейсов в формировании электронных и оптических свойств полупроводниковых гетероструктур. В ней рассмотрены квантовые ямы, квантовые точки и единичные примеси.

Физика наноструктур получила бурное развитие в конце XX века и в настоящее время широко применяется в технологии. Однако эффектами, связанными с особенностями идеальных гетероинтерфейсов, как правило, пренебрегают. Это обусловлено недостаточно изученным проявлением свойств таких интерфейсов, которые в реальных наногетероструктурах часто усредняются случайными флуктуациями состава вблизи границ. Однако в последнее

десятилетие появляются работы по прецизионному росту гетероструктур, в котором удаётся точно контролировать составы гетероструктур на уровне отдельных моноатомных слоёв. Это определяет безусловную актуальность теоретических исследований в этом направлении. Целью теории является объяснение и количественное описание различных свойств, обусловленных идеальными гетероинтерфейсами и предсказание новых физических эффектов. Именно на это и нацелена рецензируемая диссертационная работа. В диссертации М.О. Нестоклона для описания свойств наногетероструктур, обусловленных идеальными интерфейсами, развит атомистический метод сильной связи и рассмотрен ряд конкретных фундаментальных задач, таких как спиновое расщепление за счёт интерфейсной инверсионной асимметрии в квантовых ямах $A^{III}B^V$, Si/Ge и CdTe/HgTe/CdTe, выращенных вдоль различных кристаллографических направлений, роль упругих деформаций в спиновом расщеплении, тонкая структура состояний в многодолинных материалах, обусловленная междолинным смешиванием на интерфейсах в квантовых точках из халькогенидов свинца, в квантовых точках ядро-оболочка Ge/Si и квантовые ямы SiGe/Si/SiGe, оптические свойства квантовых точек GaAs/GaP, исследована тонкая структура акцепторных состояний Mn в GaAs, обусловленная локальной конфигурацией химических связей вблизи примеси. Все задачи, решаемые в рамках диссертации М.О. Нестоклона, представляют значительный интерес для научного сообщества, а **актуальность темы диссертации не вызывает сомнений.**

Диссертация М.О. Нестоклона состоит из введения, пяти глав, и заключения. Во введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулированы цели и задачи исследования, обозначена научная новизна исследований и полученных результатов.

В *первой главе* приведён обзор атомистических методов расчёта электронных состояний: некоторых методов квантовой химии, метода функционала плотности и нескольких эмпирических методов.

Дальнейшие главы диссертации содержат ряд **новых оригинальных результатов**. *Вторая глава* диссертации посвящена детальному описанию метода сильной связи, который использовался в расчётах конкретных физических эффектов. Описан вариант метода с расширенным базисом $sp^3d^5s^*$, приведено краткое описание программы для расчёта состояний, приведена схема учёта упругих деформаций на атомистическом уровне и процедура расчёта оптических свойств наноструктур в рамках метода сильной связи. Метод проиллюстрирован рядом оригинальных результатов: расчётом интерфейсных состояний в гетероструктурах InAs/AlSb, новой схемой описания в методе сильной связи тройных

растворов из системы InAsAlSb, и расчётами анизотропии оптических переходов на интерфейсе типа II в гетероструктурах ZnSe/BeTe и InAs/AlSb.

В *третьей главе* диссертации с использованием микроскопических расчётов в методе сильной связи и качественного описания результатов в рамках кр метода проанализировано спиновое расщепление электронных подзон размерного квантования в различных квантовых ямах. Показано, что, кроме слагаемых за счёт структурной инверсионной асимметрии и объёмной интерфейсной асимметрии, большую роль также играют слагаемые, обусловленные интерфейсной инверсионной асимметрией. Детально исследована относительная роль таких слагаемых в ямах AlGaAs/GaAs/AlGaAs, показано, что такие слагаемые приводят к наличию заметного спинового расщепления в квантовых ямах на основе centrosимметричных полупроводников. Проанализировано также спиновое расщепление в квантовых ямах выращенных вдоль кристаллографического направления [110]. Показано, что в этой геометрии интерфейсные слагаемые не только дают вклад в спиновое расщепление вида слагаемого Дрессельхауза, но и приводят к дополнительному слагаемому с видом, отличным от слагаемых Дрессельхауза и Рашбы. Также показано, что в таких квантовых ямах важна роль линейных слагаемых за счёт упругих деформаций из-за рассогласования постоянных решётки материалов квантовой ямы и барьеров. Предсказан новый эффект – расщепление дираковских конусов в квантовой яме HgCdTe/HgTe/HgCdTe за счёт интерфейсных слагаемых. Оценка в микроскопическом методе сильной связи показывает, что этот эффект имеет заметную величину; предсказания подтверждаются экспериментами.

Четвертая глава диссертации посвящена эффектам, обусловленным междолинным смешиванием в наноструктурах на основе многодолинных полупроводников за счёт поверхности и интерфейсов. Рассмотрены квантовые точки на основе PbSe и PbS, долинное расщепление в квантовых ямах SiGe/Si/SiGe и роль долинной структуры в спиновом расщеплении в таких ямах, предсказана важная роль L-X переключения в оптических свойствах квантовых точек ядро-оболочка Ge/Si и показано, что оптические свойства квантовых точек (In,Ga)As/GaP определяются нетривиальной структурой электронных состояний в прямом и обратном пространстве. Также приведён анализ спиновой релаксации в объёмном Ge за счёт междолинных переходов.

В *пятой главе* диссертации проанализирован вклад короткодействующего потенциала в свойства акцепторных состояний, сделан детальный расчёт волновой функции дырки на одиночной примеси замещения Mn в GaAs и проанализирована туннельная микроскопия

таких примесей вблизи поверхности (110) с учётом приповерхностных деформаций из-за реконструкции. Также предсказан новый эффект – латеральная туннельная анизотропия магнетосопротивления для полумагнитной структуры (Mn)GaAs/AlGaAs/GaAs.

Достоверность полученных результатов и выводов не вызывает сомнений, она подтверждена внутренней непротиворечивостью выбранных автором теоретических методов, аналитических и численных, и сопоставлением с результатами других авторов. Ключевые результаты диссертации подтверждены сопоставлением с данными экспериментов. Полученные в диссертации М.О. Нестоклона результаты представляют несомненный интерес для организаций, занимающихся изучением оптики наноструктур и метаматериалов, таких как Институт спектроскопии РАН, Физический институт РАН, Институт общей физики РАН, Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, МФТИ, МГУ, СПбГУ и других. Результаты данного диссертационного исследования отражены в 27 публикациях в ведущих физических журналах и одной главе в монографии и многократно докладывались соискателем на международных и российских конференциях по тематике работы. Основные положения диссертации М.О. Нестоклона, выносимые на защиту, обладают безусловной научной новизной.

Основные результаты, полученные в диссертации, могут быть рекомендованы к использованию в организациях, проводящих исследования в области физики полупроводников и ведущих разработку приборов и устройств микро- и оптоэлектроники (Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Институт физики полупроводников СО РАН, Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Институт физики твердого тела РАН, Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Институт радиотехники и электроники РАН, Институт физики микроструктур РАН, РНЦ «Курчатовский Институт», МГУ, СПбГУ, СПбГПУ и др.).

Выступление М.О. Нестоклона, по материалам диссертационной работы было заслушано и обсуждалось на научном семинаре ИФП СО РАН. Диссертационная работа в целом произвела хорошее впечатление. Научные положения и результаты диссертации обоснованы. Основные результаты работы отражены в публикациях в авторитетных российских и международных журналах, докладывались на российских и международных конференциях. Автореферат правильно и достаточно полно отражает содержание диссертационной работы.

Диссертация М.О.Нестоклона не вызывает серьезных замечаний по существу, но некоторые недостатки в изложении и оформлении работы все-таки имеются.

1) стр. 21, формула (1.15). Величина T , как видно из ее словесного определения и формулы(1.12), имеет размерность энергии, а ее производная по плотности складывается в (1.15) с потенциальной энергией электрона v_s . Таким образом, складываются величины разных размерностей.

2) стр.42. Утверждается, что в схеме со сверхячейкой, которая определена как прямоугольный параллелепипед, можно рассматривать и квантовые точки. Но ведь последние имеют различные геометрические формы, и как учитывается эта специфика, остается неясным.

3) стр.83. Без комментариев оставлено утверждение, что выбор начала системы координат при расчетах влияет на знак константы спин-орбитального взаимодействия. Надо иметь в виду, что этот знак имеет четкий физический смысл: например, в атомах он определяет порядок расположения уровней в мультиплете (нормальный или обращенный мультиплет).

Имеются также замечания технического и стилистического характера. Так, в тексте неоднократно встречается странно звучащая конструкция типа « этот метод описывает зонную структуру достаточно плохо». Значит ли это, что должен существовать метод, который автор признал бы «недостаточно плохим»? Встречаются также опечатки и пунктуационные дефекты (как излишества, так и недостатки).

Тем не менее, сделанные замечания не снижают научной значимости проведенных исследований, не ставят под сомнение новизну и достоверность полученных результатов и общую положительную оценку диссертационной работы, которая выполнена на высоком научном уровне и вносит существенный вклад в развитие теории интерфейсных эффектов в полупроводниковых гетероструктурах.

Диссертационная работа «Эффекты атомарной структуры интерфейсов в полупроводниковых наносистемах» полностью отвечает требованиям, предъявляемым ВАК РФ к диссертациям, представленным на соискание ученой степени доктора физико-математических наук, в том числе критериям II раздела Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года, No 842, а ее автор, Нестоклон М.О., безусловно заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.10-"Физика полупроводников".

Адрес организации:

Российская Федерация, 630090, Новосибирск, пр. ак. Лаврентьева, 13

Тел.: (383)330-90-55

эл. почта: ifp@isp.nsc.ru

Веб-сайт: <http://www.isp.nsc.ru/>

Главный научный сотрудник

Института физики полупроводников им. А.В. Ржанова

СО РАН,

академик, д. ф.-м. н.

Чаплик

Александр Владимирович

Отзыв утвержден на Ученом Совете ИФП, протокол № 7
от 10 июля 2017г.

Ученый секретарь

Института физики полупроводников им. А.В. Ржанова

СО РАН

к.ф.-м.н.

С.А. Аржанникова