

ОТЗЫВ

официального оппонента о диссертационной работе
Нестоклона Михаила Олеговича
«Эффекты атомарной структуры интерфейсов в полупроводниковых наносистемах»,
представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук
по специальности – 01.04.10 – физика полупроводников.

Современную физику полупроводников невозможно представить себе без такой области, как физика гетероструктур различного типа. Искусственное управление спектром и свойствами электронных состояний полупроводниковых объектов малого размера стало уже привычным делом. При этом для некоторых гетероструктур вполне достаточным для описания их свойств оказался обобщенный метод эффективной массы (кр-метод). Однако при описании структур из полупроводников с сильным спин-орбитальным взаимодействием возникает проблема правильного учета рассеяния, которое происходит на атомарно-резкой границе раздела двух полупроводников. Аналогичная проблема появляется и в многодолинных полупроводниках, связанная с междолинным рассеянием на интерфейсах. В методе эффективной массы необходимо решать довольно сложную вспомогательную задачу о выводе эффективных граничных условий для атомарно резкой границы. В противоположность методу эффективной массы, метод сильно связанных электронов (сильной связи) исходно строится, как метод описания твердых тел на атомарном уровне, и поэтому гораздо лучше приспособлен для учета возмущений от «атомарно-резких» границ. Этот метод часто рассматривается как приближение, однако, в последние 15-20 лет, появилось понимание того, что при правильном выборе квазиатомных орбиталей этот подход является не менее точным, чем другие методы.

В диссертационной работе М.О.Нестоклона продемонстрировано преимущество использования подхода сильной связи для исследования свойств ряда полупроводниковых структур. Развивая теорию сильной связи, автору удалось получить ряд новых результатов, безусловно, полезных для практических приложений.

Если попробовать выделить самое существенное, что сделано в диссертации, то это, на мой взгляд, предложенный метод учета деформаций в подходе сильной связи и подкрепленный расчетами вывод, что именно деформационные эффекты на интерфейсах часто играют определяющую роль в структуре электронных уровней. Во второй главе продемонстрировано, что развитый метод дает очень хорошее согласие с экспериментом при расчете зависимости ширины запрещенной зоны тройных растворов InGaAsSb от состава.

Применяя метод сильной связи с учетом деформаций близи интерфейсов к расчету структуры уровней в квантовых ямах полупроводников A_3B_5 , было найдено, что спиновое расщепление во многом определяется интерфейсным вкладом. Причем в этот эффект большой вклад могут вносить именно деформации у границы. А в разделе 3.3 показано, что в квантовых ямах $InGaAs/InAs/InGaAs$ спиновое расщепление, обусловленное упругими деформациями, доминирует. Заметим, что этот эффект трудно учесть в рамках k_p -метода.

Вместе с тем, обобщенный метод эффективной массы (k_p -метод) обладает простотой и наглядностью, часто позволяет легко понять качественные особенности спектра гетеросистем. Поэтому несомненным достоинством диссертации является сопоставление полученных результатов (во всех разделах) с k_p -методом и определение, где это возможно, эффективных граничных условий из метода сильной связи.

Интересный вывод был сделан для квантовых ям $CdTe/HgTe/CdTe$, которые сейчас рассматриваются, как одна из реализаций системы, называемой топологическим изолятором. Показано, что при правильном вычислении электронных состояний возникает расщепление между конусами спектра, вызванное смешиванием состояний легкой и тяжелой дырок на гетерограницах. Этот результат должен заставить пересмотреть взгляд на свойства данной структуры и возможную реализацию в ней состояния топологического изолятора.

Аналогично смешиванию различных спиновых состояний, в многодолинных полупроводниках на атомном интерфейсе также должно происходить смешивание состояний из разных долин. Эта группа эффектов была исследована в 4 главе диссертации.

Было показано, насколько чувствительна структура уровней в квантовых точках $PbSe$ и PbS к форме квантовой точки из-за эффектов междолинного смешивания на границе. Изучена связь спинового и долинного расщепления подзон в квантовых ямах $SiGe/Si/SiGe$. Интересный результат получен для нанокристаллов ядро-оболочка Ge/Si . В таких нанокристаллах ожидалось, что при достаточно толстой оболочке кремния электроны перетекут из ядра в оболочку и возникнет разделение зарядов, сказывающееся на излучательной рекомбинации. Однако расчеты диссертанта показывают, что уменьшение интенсивности люминесценции и сдвиг в длинноволновую сторону происходит раньше разделения зарядов за счет перехода электронных состояний основного уровня из X в L долину.

Также довольно неожиданный и, безусловно, важный результат был получен при изучении низколежащих электронных и дырочных состояний в квантовых точках $GaAs$ в матрице GaP . Дырочные состояния получились локализованными вблизи вершины внутри квантовой точки. Но наименее электронные состояния оказались локализованы вне

квантовой точки, причем их локализация, энергии и происхождение из X-долин GaP обусловлены деформационными эффектами в матрице GaP. Эти расчеты хорошо объясняют имеющиеся экспериментальные данные по сдвигу края излучения в такой системе под давлением.

В последней главе проведен детальный разбор того, как должна выглядеть локальная плотность локализованного на M_n акцепторного состояния. Один из существенных результатов заключается в том, что пространственное распределение волновой функции локализованного состояния M_n вблизи туннельного барьера заметно меняется в зависимости от направления намагниченности M_n .

В целом, материал в диссертации изложен ясно, поэтому появляющиеся при чтении диссертации замечания имеют, скорее, характер уточнений.

В разделе 2.4 сказано, что вероятности оптических переходов вычислялись без учета внутриатомных матричных элементов. Можно было бы подробнее объяснить, почему в ковалентных кристаллах эти переходы играют незначительную роль.

Приведенные в разделе 3.1 формулы вида 3.1-3.3 имеют смысл для малых волновых векторов k . В подходе сильной связи всегда получаются общие выражения для произвольных k . Можно понять, что сравнение формул сильной связи с формулами, аналогичными 3.1-3.3 проводилось для малых k , хотя об этом явно не говорится. Как это делалось и может ли быть существенным, что при больших волновых векторах точные выражения сильной связи не сводятся к формулам вида 3.1-3.3 ?

В разделе 4.1 показано, что тонкая структура состояний для квантовых точек PbS, PbSe сильно зависит от конкретного расположения атомов (симметрии кластера). В реальных образцах вряд ли можно добиться точной симметрии формы и расположения атомов. Поэтому, вообще говоря, для сравнения с экспериментом нужно было бы проводить усреднение по ансамблю точек немного разной формы.

Наконец, полученная в разделе 5.3 анизотропная зависимость величины «туннельного хвоста» волновой функции акцепторных состояний M_n от направления намагниченности, строго говоря, не есть напрямую магнитная анизотропия туннельного тока. Этот результат является только указанием на причину, по которой такая анизотропия может появляться.

Приведенные выше замечания никак не затрагивают основные результаты диссертации и не влияют на положительную оценку диссертации в целом. Вошедшие в диссертацию результаты были своевременно опубликованы в 27 статьях в ведущих журналах по физике, рекомендованных ВАК России и индексированных в базах данных Web of Science и Scopus, и в главе монографии-сборника. Все эти статьи объединены единой тематикой и, собранные в диссертацию, представляют собой законченный цикл

исследований. Достоверность всех вошедших в диссертацию результатов обеспечивается применением адекватных теоретических методов и подтверждается сравнением с экспериментальными данными. Результаты докладывались на большом количестве семинаров, российских и международных конференций, их корректность и обоснованность не вызывает сомнений. В автореферате правильно и полностью изложено содержание диссертационной работы.

Таким образом, диссертация Нестоклона Михаила Олеговича «Эффекты атомарной структуры интерфейсов в полупроводниковых наносистемах» полностью удовлетворяет всем требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней, предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор, безусловно, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников.

02 октября 2017 г.

Официальный оппонент

Арсеев Петр Иварович

Гнс Отделения теоретической физики им. И.Е. Тамма
Физического института им. П.Н. Лебедева РАН
д.ф.-м.н., член-корреспондент РАН
Почтовый адрес: 119991 Москва,
Ленинский проспект 53
Тел. 499-1326271
ars@lpi.ru

Подпись П.И.Арсеева заверяю

Заместитель директора ФИАН,
д.ф.-м.н.

С.Ю.Савинов