

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)

на диссертацию Нестоклона Михаила Олеговича
"Эффекты атомарной структуры интерфейсов в полупроводниковых наносистемах",
представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников

В диссертации Михаила Олеговича Нестоклона затронут достаточно широкий круг вопросов, касающихся электронных, спиновых и оптических свойств различных полупроводниковых нанообъектов – квантовых ям, квантовых точек (нанокристаллов), примесных центров. При этом основное внимание уделено теоретическому исследованию фактора асимметрии в системе, проявляющейся на атомном уровне. В частности, в главе 3 автор исследует спиновое расщепление в спектре квантовых ям, порождаемое отсутствием центра инверсии в наноструктуре, которое, само по себе, может быть следствием объемной, структурной, а также интерфейсной асимметрии. Последняя составляет предмет пристального внимания автора на протяжении всей диссертационной работы. Анализируются вклады всех трех типов асимметрии, и делается вывод о важности интерфейсного вклада. Глава 4 посвящена эффектам долинного и спинового расщепления спектра в квантовых точках и квантовых ямах на основе многодолинных полупроводников. Рассматривается также поглощение света в квантовых точках на основе арсенида индия и анализируется роль деформаций, возникающих в квантовой точке. Исследуется спиновая релаксация в германии, идущая на внутри- и междолинных фонах. В 5-й главе изучается тонкая структура акцепторных состояний в арсениде галлия с учетом короткодействующего потенциала акцептора и рассматривается влияние приложенных упругих напряжений на акцепторные состояния. Практически все расчеты, выполненные в диссертации, базируются на едином подходе – методе сильной связи – детали которого подробно описаны автором в главе 2. Глава 1 содержит литературный обзор по методам расчета электронных состояний в полупроводниковых системах.

Избранная автором тематика диссертационного исследования, несомненно, актуальна. Вопросы, затронутые в работе, а также смежные с ними, интенсивно обсуждаются в последние 10-15 лет как на российских, так и международных конференциях. В отечественных и зарубежных научных журналах публикуется огромное число статей по данной тематике. Безусловно, она вызывает самый живой интерес у широкой научной общественности.

В основу диссертационного исследования, выполненного автором, положено изучение особенностей, вносимых интерфейсами в электронное и спиновое строение, а также в оптические свойства различных полупроводниковых гетеросистем. Контакт двух (или более) полупроводниковых материалов – фактически, неотъемлемый атрибут любого элемента или прибора электроники и (или) спинтроники, успешное и полноценное

функционирование которого зависит, в первую очередь, от понимания свойств системы и закономерностей происходящих в ней процессов. Соответственно, понимание роли интерфейсов является одним из актуальных аспектов общей проблемы инкорпорирования различных полупроводниковых материалов в современную элементную приборную базу. Это определяет практическую значимость работы М.О. Нестоклона.

Предпринятое М.О. Нестоклоном исследование обладает научной новизной. Им был разработан (и использован в работе) способ включения упругих напряжений в модель сильной связи, основанный на учете валентных сил, действующих на атомы. Теоретически предсказано расщепление дираковских конусов и образование щели в спектре квантовых ям HgTe/CdTe критической ширины и близкой к критической и сделаны расчеты величины расщепления и щели. Показано, что эти эффекты обусловлены, в основном, инверсионной асимметрией интерфейсов. Обнаружен и объяснен, исходя из симметричных соображений, эффект резкого подавления долиного расщепления в нанокристаллах халькогенидов свинца, центрированных относительно междоузлия, т.е., в отсутствие в них центра инверсии. Выявлено ухудшение излучательной способности германиевых нанокристаллов в широкозонной матрице диоксида кремния при покрытии их кремниевой оболочкой.

Сформулированные автором научные положения физически обоснованы. Задачи, решаемые в диссертации, имеют ясную и четкую постановку, их решение основано на современных аналитических и численных методах квантовой механики, теории полупроводников, полупроводниковой оптики. Полученные автором решения относятся к реальным полупроводниковым материалам и структурам – они либо сопоставляются с экспериментами, либо могут быть сопоставлены. При расчетах автором используется метод сильной связи, имеющий ряд преимуществ по сравнению с другими методами. В частности, он позволяет корректно учитывать атомное строение исследуемой системы, подобно первопринципным методам расчета, однако, в отличие от них, не требует таких колоссальных временных ресурсов. В результате, метод сильной связи оказывается применим к объектам с размерами, которые пока недоступны первопринципным методам. С другой стороны, широко применяемое до настоящего времени приближение огибающей, справедливое именно для систем, чьи размеры существенно превышают постоянную решетки вещества из которого эти системы состоят, фактически не может (по крайней мере, естественным образом) описывать процессы, протекающие на атомных масштабах. Так, например, один из основных вопросов, решаемых в диссертации, – об интерфейсном вкладе в энергетические спектры различных наносистем – наиболее легко и естественно решается в рамках модели сильной связи. Решение же этого вопроса в приближении огибающей наталкивается на существенные трудности, связанные, прежде всего, с невозможностью строгого описания атомарной структуры интерфейса. Автором были осмыслены и проанализированы подходы и приближения, применявшиеся ранее другими исследователями в этой области, и проработана обширная литература по исследуемым и смежным вопросам. Перечень использованных источников содержит 298 наименований.

Достоверность полученных в диссертационной работе результатов подтверждается их внутренней непротиворечивостью, наглядной интерпретацией и логичным истолкованием, физической обоснованностью и математической строгостью подходов, количественным сопоставлением (как правило, удачным) с данными экспериментов или с расчетами других авторов.

Практически все задачи, рассмотренные в диссертации, прошли своего рода предварительное «тестирование». Вначале автором выбиралась расчетная модель (чаще всего это была модель сильной связи $sp^3d^5s^*$), параметры которой определялись из сопоставления некоторых расчетных характеристик исследуемой системы с экспериментальными или расчетными (выполненными на основе первых принципов или приближения огибающей) данными, известными из литературы. После этого, уже с выбранными таким образом параметрами модели, делался расчет каких-либо новых характеристик и параметров системы.

Результаты выполненных исследований были широко представлены автором на российских и международных конференциях, а также в ведущих отечественных и зарубежных научных журналах. Перечень публикаций автора по теме диссертации содержит 28 статей, опубликованных в журналах, входящих в перечень ВАК. Работы М.О. Нестоклона известны научной общественности. Его компетентность в области физики полупроводников и полупроводниковых структур несомненна.

Диссертационное исследование выполнено на высоком научном уровне, с применением современных расчетных и аналитических методов. Представляется, тем не менее, что в тексте диссертации в некоторых случаях изложение можно было бы сделать более понятным, а результаты (возможно) – более точными.

1. Основными объектами исследования в работе являются квантовые ямы, для которых, в частности, рассчитывается спиновое и (или) долинное расщепление в спектре, обусловленное, в том числе, и отсутствием инверсионной симметрии интерфейсов. При этом предполагается наличие вполне конкретной точечной симметрии интерфейсов, задаваемой типом кристаллической структуры контактирующих материалов, и количеством атомных слоев (четным или нечетным) в квантовой яме. Эта симметрия определяет гамильтониан задачи и, в конечном итоге, получающиеся результаты. Вместе с тем понятно, что реальные интерфейсы не могут обладать той «абсолютной» симметрией, которая закладывается в расчетную модель – ведь даже ширина квантовой ямы (т.е. количество атомных слоев) вряд ли будет оставаться неизменной при перемещении в плоскости ямы. В связи с этим возникает вопрос – нужно ли в этом случае при расчетах интерфейсного вклада вообще приписывать квантовой яме какую-то точечную кристаллографическую симметрию, как это делается в работе? Думаю, что в диссертации имело смысл коснуться, хотя бы на качественном уровне, этого вопроса.

2. При рассмотрении нанокристаллов халькогенидов свинца (раздел 4.1) ничего не говорится о процедуре релаксации нанокристаллов после того как они были «вырезаны» из решетки объемного кристалла. Вместе с тем, в главе 2 детально описывается оригинальный авторский способ учета и снятия напряжений в рамках модели сильной связи. Остается неясным – была ли задействована описанная в главе 2 процедура при решении задачи о нанокристаллах халькогенидов свинца. Хорошо известно, что электронная структура нанокристаллов бывает, как правило, довольно чувствительна к снятию напряжений, что приводит к заметным количественным изменениям в их спектрах. В этой связи учет релаксационных процессов представляется крайне желательным.

3. На страницах 128, 130 (речь опять идет о нанокристаллах халькогенидов свинца) говорится об отсутствии влияния поверхностной химии на свойства нанокристаллов, в частности, указывается на то, что «... даже без

пассивации, поверхностных состояний в запрещенной зоне ... не возникает.». Но на рисунке 4.4, где приведены фрагменты электронной структуры одних и тех же нанокристаллов с пассивацией оборванных связей и без нее, различия видны «невооруженным глазом». Глубокие уровни в запрещенной зоне, действительно, отсутствуют, но сами спектры различаются очень существенно. Причем важно заметить, что различия эти носят не только количественный, но и качественный характер – расщепление основного состояния происходит по-разному. Не вполне понятно, что имел в виду автор, говоря об отсутствии эффекта химии поверхности.

4. В самом начале раздела 5.1.2, на странице 197, делается утверждение, что потенциал примеси имеет симметрию группы тетраэдра. В то же время ранее, на странице 192, приводится явное выражение для потенциала примеси (формула (5.1)), которое является сферически симметричным. Возникает вопрос – или расчеты проводились с другим потенциалом, отличным от (5.1), или, говоря о симметрии группы тетраэдра, автор имел в виду потенциал не самой примеси, а всей системы в целом?

Сделанные замечания, однако, не ставят под сомнение справедливость полученных автором результатов и обоснованность выбранных подходов для решения рассматриваемых задач. Несмотря на замечания, высокая оценка уровня диссертационной работы полностью сохраняется. 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 М.О. Нестоклона “Эффекты атомарной структуры интерфейсов в полупроводниковых наносистемах” в полной мере отвечает требованиям ВАК, предъявляемым к докторским 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, Нестоклон Михаил Олегович, заслуживает присуждения ученой степени доктора 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

30 сентября 2017