

ОТЗЫВ

официального оппонента, доктора физико-математических наук, профессора кафедры физики твёрдого тела Санкт-Петербургского государственного университета Вербина Сергея Юрьевича (адрес: 198504, Санкт-Петербург, Петродворец, ул. Ульяновская, д.1, телефон: +7 (812) 428-45-46, e-mail: s.verbin@spbu.ru)

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 Михаила Олеговича Нестоклона посвящена теоретическому исследованию ряда важных с фундаментальной и прикладной точки зрения эффектов в полупроводниковых наносистемах, обусловленных микроскопической структурой интерфейсов, а именно, влиянию последних на спиновые, долинные и оптические свойства таких структур. Для этого автором были широко использованы как атомистические расчёты в методе сильной связи, так и симметричный анализ с использованием теории представлений групп, а также детальный анализ полученных результатов в k -р методе.

Актуальность и востребованность этих исследований не вызывает сомнений, поскольку речь идет об исследовании тех свойств наносистем, которые до сих пор не были изучены достаточно подробно. Результаты изучения М. О. Нестоклоном спиновых свойств наноструктур с применением метода сильной связи, как включенные в диссертацию, так и оставшиеся за её рамками, хорошо известны специалистам в области теории полупроводниковых гетероструктур.

Диссертация состоит из Введения, 5 глав и заключения. В списке литературы, помимо списка работ автора, вошедших в диссертацию (28 статей, включая статьи в ЖЭТФ, Phys. Rev. Lett, 14-ти статей в Phys. Rev. B) – 298 публикаций.

Актуальность вошедших в диссертацию исследований, их новизна и практическая значимость убедительно аргументированы во Введении. Сформулированы цели диссертационной работы и основные положения, выносимые на защиту, приведены сведения об апробации работы, кратко описаны структура диссертации и содержание ее глав.

В первой главе диссертации приведён краткий обзор различных методов расчёта электронных состояний в полупроводниках. После общего введения, в котором обсуждается вычислительная сложность различных подходов на примере основных квантово химических методов, более подробно рассмотрен метод функционала плотности, детально разобраны его достоинства и недостатки, обсуждается вычислительная сложность этого метода. Далее сделан обзор ряда более эмпирических методов: метода псевдопотенциала, **k_p** метода и эмпирического метода сильной связи, широко используемых в теории зонной структуры полупроводников

В главах 2-5 диссертации М. О. Нестоклона получен большой объем новых фундаментальных результатов, среди которых я хотел бы выделить следующие.

1. Разработка оригинальной схемы учёта упругих деформаций в рамках метода сильной связи (глава 2). Хотя в литературе известно несколько подходов к решению этой проблемы, автором диссертации предложен вариант, который позволяет не только количественно учесть на атомном уровне влияние упругих деформаций кристаллической решётки на зонную структуру полупроводниковых наносистем, но и проследить нелинейную зависимость зонной структуры твёрдых растворов от состава.

2. Автором убедительно продемонстрировано, что интерфейсный вклад в спиновое расщепление электронных состояний в квантовых ямах полупроводников $A^{III}B^V$ сопоставим с вкладом Дрессельхауза. Кроме того, весьма важным является доказательство качественного изменения энергетического спектра носителей тока в области топологического перехода, приводящего, в частности, к раздвижке дираковских конусов, вследствие замешивания электронных и дырочных состояний на интерфейсе в квантовой яме CdHgTe/HgTe/CdHgTe (глава 3).

3. Весьма впечатляющие результаты получены диссертантом при исследовании свойств наноструктур на основе многодолинных материалов. Хотя тот факт, что размерное квантование в низкоразмерных структурах приводит к частичному снятию закона сохранения импульса и смешиванию состояний из различных долин не является сам по себе новым, принципиально новым является успешный количественный анализ ряда конкретных эффектов, обусловленных таким смешиванием, приведённый в 4 главе. Например, в диссертации показано, что оптические свойства наноструктур, прежде всего, квантовых точек из многодолинных материалов, существенно зависят от сложной долинной структуры электронных состояний. Кроме того, в главе 4 исследовано влияние многодолинной структуры электронных состояний на обусловленное интерфейсами спиновое расщепление в квантовых ямах на основе полупроводников с алмазной решёткой.

4. В пятой главе показано, что анизотропная часть короткодействующего потенциала оказывает заметное влияние на форму волновой функции дырки, связанной на глубоком акцепторе в полупроводниках с решёткой цинковой обманки и алмаза. Важным результатом является теоретическое обоснование ключевой роли, которую играет взаимодействие с поверхностью состояния, связанного на нейтральном акцепторе, при формировании изображений глубоких акцепторов, получаемых с помощью атомной туннельной микроскопии.

Достоверность результатов, полученных в диссертации, подтверждается внутренней непротиворечивостью результатов, использованием совершенного аппарата теоретической физики и симметричного анализа, сопоставления полученных результатов с данными эксперимента.

Высокая **научная и практическая значимость** этих результатов обусловлена тем, что в диссертации построена теория ряда фундаментальных физических явлений в полупроводниковых наноструктурах, обусловленных структурой идеальных интерфейсов. Решенные в диссертации задачи открывают возможность более полного контроля спиновых и долинных свойств наноструктур. Например, было продемонстрировано, что спиновое расщепление в квантовых ямах на основе SiGe/Si/SiGe в основном обусловлено интерфейсами и сильно зависит от долиного расщепления электронных уровней в таких структурах.

Диссертация не лишена некоторых, впрочем, весьма незначительных, **недостатков**.

1. Прежде всего, хотелось бы отметить, что обнаружение сильного влияния даже малых величин рассогласования кристаллических решеток в гетероструктурах на их спиновое расщепление представляется весьма интересным и достаточно неожиданным результатом, который стоило в главе 3 диссертации обсудить более подробно, включая возможные физические причины, которые приводят к этому.
2. При рассмотрении во второй главе вопроса об адекватности описания свойств реальных полупроводниковых твердых растворов в приближении виртуального кристалла имело смысл обратить внимание также на имеющие непосредственное отношение к этому результаты исследований сотрудников ФТИ С.А.Пермогорова и А.Н.Резницкого (см, например, их статью в Journal of Luminescence, т. 52, с. 201 (1992) и ссылки в ней).

3. Форма положения 1, выносимого на защиту, выглядит неудачной, более подходящей для описания результатов, полученных в диссертации.
4. Имеются небольшие технические погрешности в тексте диссертации, так во многих местах отсутствуют необходимые запятые, встречаются неудачные формулировки, например, «В таблице 3.1 просуммированы ширины зон E_g , эффективные электронные массы ...»

Указанные недостатки ни в коей мере не уменьшают ценности диссертации, выполненной на очень высоком и современном научном уровне.

В целом диссертационная работа М. О. Нестоклона «Эффекты атомарной структуры интерфейсов в полупроводниковых наносистемах» заслуживает самой высокой оценки благодаря высокому научному уровню ее выполнения, новизне результатов, ясности изложения. Одним из важнейших достоинств работы является тесное сотрудничество автора с экспериментаторами – некоторые теоретические результаты уже нашли экспериментальное подтверждение.

Автореферат и опубликованные статьи правильно и достаточно полно отражают содержание диссертации.

Диссертация М. О. Нестоклона является законченным исследованием, имеющим важное научное и прикладное значение для физики. Таким образом, диссертационная работа М. О. Нестоклона «Эффекты атомарной структуры интерфейсов в полупроводниковых наносистемах» полностью отвечает критериям пунктов 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней» для ученой степени доктора наук, утвержденного постановлением Правительства от 24.09.2013 г. № 842, а ее автор Михаил Олегович Нестоклон заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников.

Заведующий кафедрой физики твёрдого тела
профессор Санкт-Петербургского
государственного университета, д. ф.-м. н.

Подпись С. Ю. Вербина

18 сентября 2017

