

“УТВЕРЖДАЮ”  
Проректор по научной работе  
Федерального  
государственного бюджетного  
образовательного учреждения  
высшего образования «Санкт-  
Петербургский  
государственный университет»

С.В. Микушев

“    ” \_\_\_\_\_ 2020 г.

### **Отзыв ведущей организации**

федерального государственного бюджетного образовательного учреждения  
высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет»  
на диссертационную работу **Семиной Марины Александровны**  
**«ТЕОРИЯ КУЛОНОВСКИХ КОМПЛЕКСОВ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ  
И НАНОСИСТЕМАХ»**,  
представленную в диссертационный совет ФТИ 34.01.02 при Федеральном  
государственном бюджетном учреждении науки Физико-техническом  
институте им. А.Ф.Иоффе Российской академии наук на соискание ученой  
степени доктора физико-математических наук  
по специальности 01.04.02 – теоретическая физика

Диссертация М.А. Семиной посвящена теоретическому исследованию кулоновских комплексов: нейтральных и заряженных экситонов, их строения и энергетического спектра, включая тонкую структуру энергетического спектра, а также оптических свойств экситонов и трионов в полупроводниках и полупроводниковых наносистемах.

## **Актуальность темы диссертационной работы**

Одной из важнейших и наиболее актуальных задач современной теории конденсированных средств является исследование различных корреляционных эффектов обусловленных кулоновским взаимодействием. Именно межчастичное взаимодействие определяет строение кристаллов, а также их электронные транспортные и оптические свойства. Диссертационная работа М. А. Семиной нацелена на комплексные теоретические исследования широкого круга вопросов, связанных со строением и оптическими свойствами кулоновских комплексов в полупроводниках и полупроводниковых низкоразмерных системах: квантовых ямах, точках, проволоках, а также в атомарно-тонких кристаллах.

Достижения современной нанотехнологии открывают возможности создания систем с наперёд заданной структурой, параметрами и свойствами. Оптические свойства таких систем определяются как правило электрон-дырочная комплексами с малым числом частиц: электрон-дырочными парами (экситонами), трёхчастичными комплексами (положительно и отрицательно заряженными трионами), а также экситонными молекулами – биэкситонами. Свойства таких кулоновских комплексов активно исследуются как теоретически, так и экспериментально, а соответствующие полупроводники и наносистемы имеют широкие перспективы применений в устройствах оптоэлектроники и фотоники. Кроме того, экситоны и трионы являются аналогами водородоподобных атомов и ионов, что немаловажно с точки зрения фундаментальной физики.

Это выводит на повестку дня вопрос о разработке теоретических методов для описания кулоновских комплексов с малым числом частиц в полупроводниках. **Решению таких задач и посвящена диссертация М.А. Семиной, ее актуальность не вызывает сомнений.**

## **Новизна исследований и полученных результатов**

Научная новизна диссертации заключается, с одной стороны, в развитии теоретических подходов к описанию кулоновских комплексов в полупроводниках и полупроводниковых низкоразмерных системах, основанных на использовании простых вариационных принципов с небольшим числом варьируемых параметров, так и более сложных методов, использующих базисные разложения большого размера и численную диагонализацию гамильтониана взаимодействующей системы частиц. С другой стороны научная новизна обусловлена решением конкретных научных задач и исследованием ряда фундаментальных физических явлений, включая эффекты локализации носителей заряда на неоднородностях структуры, эффект Зеемана в «сложной» валентной зоне, эффект Парселла на экситонах в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах.

## **Структура и содержание диссертации.**

Диссертация содержит 309 страниц, включая 70 рисунков и 9 таблиц. Она состоит из Введения, пяти глав, Заключения и списка литературы, включающего 402 ссылки.

Во Введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулированы цели и задачи исследования, обозначена научная новизна полученных результатов. Дальнейшие пять глав диссертации содержат новые оригинальные результаты, полученные М.А. Семиной. Отметим из них наиболее яркие, важные и интересные:

В первой главе описан оригинальный предложенный автором метод построения вариационных функций, пригодных для исследования кулоновских комплексов в наносистемах. Суть метода состоит в выделении предельных

случаев, где в соответствующем многочастичном уравнении Шредингера допустимо разделение переменных (например, когда электронная подсистема оказывается «быстрой» по сравнению с дырочной, или когда возможно разделить переменные центра масс и относительного движения частиц), нахождении соответствующих этим предельным случаям волновых функций, а затем в построении пробной функции в виде взвешенных произведений волновых функций, соответствующих тем или иным предельным случаям. Этот метод апробирован на описании экситонов и трионов, локализованных на несовершенствах интерфейсов структур с квантовыми ямами и квантовыми проволоками, даны оценки погрешности предложенного автором метода и приведено краткое сопоставление с результатами других расчетов (в частности, численной диагонализации гамильтониана) и экспериментов. Этот метод применяется автором и в последующих главах диссертации для построения вариационных функций.

Еще одним интересным результатом первой главы является теоретический анализ энергетического спектра возбужденных состояний кулоновского комплекса (экситона или электрона, локализованного на доноре) с пространственным разделением носителей заряда. Автор указывает, что подобная ситуация, которая может быть реализована в экспериментально доступных полупроводниковых наноструктурах, позволяет проследить эволюцию уровней между двумя случаями, где имеется так называемое случайное вырождение спектра – кулоновской задачей и задачей о гармоническом осцилляторе.

Вторая глава диссертации посвящена теории кулоновских комплексов в рамках модели гамильтониана Латтинжера. Эта известная и широко распространенная в физике полупроводников модель учитывает трехкратное вырождение орбитальных блоховских функций вершины валентной зоны многих кристаллов IVой группы, а также бинарных соединений III-V и II-VI. В результате спин-орбитального взаимодействия вершина валентной зоны

оказывается четырехкратно вырожденной, а дырочные состояния можно описывать как состояния квазичастиц с полным моментом  $3/2$ . Конкуренция эффектов «сложной» зоны, в частности, зависимости эффективной массы от параметров локализации дырки, и кулоновского притяжения может приводить, как показано М. А. Семиной к ряду интересных эффектов. В частности, при переходе от объемного кристалла к одномерной (квантовая проволока) или двумерной (квантовая яма) системе энергия связи акцепторной примеси может как увеличиваться, так и уменьшаться. Последний результат является неожиданным, поскольку обычно локализация приводит к усилению кулоновских эффектов и, соответственно, к увеличению энергий связи. В этой же главе развит общий метод расчета факторов Ланде дырки, локализованной в квантовой точке, и в рамках модели параболического потенциала прослежена эволюция дырочных состояний при изменении формы квантовой точки. Показано, что величина  $g$ -фактора дырки коррелирует с орбитальным составом дырочной блоховской функции.

Общие методы расчета кулоновских комплексов проиллюстрированы автором в главе 3, где описан ряд экспериментальных данных по  $g$ -факторам дырок и размерному квантованию в полупроводниковых наносистемах на основе, главным образом, материалов II-VI. Здесь же дано обобщение полученных во второй главе результатов на случай профиля потенциала квантовой точки, описываемого потенциалом в виде функции Гаусса. Такая модель оказывается адекватной для описания размерного квантования в ряде нанокристаллов и квантовых точек. Следует также отметить анализ кулоновских корреляций в биекситоне, локализованном в нанокристалле в режиме сильного размерного квантования, где, на первый взгляд, кажется, что корреляциями в движении носителей заряда можно пренебречь.

Две последние главы диссертации нацелены на исследование кулоновских комплексов в материальных системах, ставшими весьма актуальными в последние несколько лет.

Глава 4 посвящена кулоновским комплексам в атомарно-тонких кристаллах на основе дихалькогенидов переходных металлов. Эти системы, помимо богатой тонкой структуры электрон-дырочных комплексов, обусловленной многодолинным характером зонной структуры таких систем, а также спин-орбитальным взаимодействием, обладают весьма специфичным законом взаимодействия носителей заряда, который существенно отличается от кулоновского. Автор не только развила теоретическое описание экситонов и трионов в таких системах, но и исследовала оптические свойства гетероструктур с монослойными полупроводниками. В частности, дана разгадка аномально большому отражению на возбужденных состояниях экситона, а также предсказана (и обнаружена) значительная модуляция излучательного времени жизни экситона в зависимости от диэлектрического окружения.

В главе 5 развивается теория так называемых ридберговских – возбужденных – состояний экситонов в объемных полупроводниковых кристаллах. Эти исследования мотивированы недавними экспериментами по наблюдению ридберговских экситонов в закиси меди. Диссертантом исследованы особенности тонкой структуры спектра экситонов, обусловленные кубической симметрией кристалла, исследована электрооптика экситонов, а также обобщены концепции, известные в атомной физике, в частности, скейлинг параметров, на случай ридберговских экситонов. Следует подчеркнуть, что в сотрудничестве с экспериментаторами были обнаружены интересные неожиданные результаты, состоящие в том, что прямая аналогия с теорией ридберговских состояний свободных атомов не работает, например, скейлинг поляризуемостей, а также поля резонанса состояний в магнитном поле для экситонов отличается от скейлинга для свободных атомов.

М.А. Семина является признанным специалистом в области теории экситонов и трионов в полупроводниках и наносистемах. Результаты диссертационного исследования опубликованы в 27 научных работах в ведущих отечественных и зарубежных журналах, в том числе, в *Physical Review B*, *Physical Review Letters*, Письма в ЖЭТФ. Работы М.А. Семиной многократно представлялись на российских и международных конференциях по физике низкоразмерных систем и полупроводников, в том числе и приглашенными докладами. Основные положения диссертации М.А. Семиной, выносимые на защиту, обладают безусловной **научной новизной**.

**Достоверность** результатов и выводов также не вызывает сомнений, что подтверждается внутренней непротиворечивостью теоретических подходов, сопоставлением различных методов расчета, аналитических и численных, сравнением с результатами других авторов. Многие результаты уже нашли свое экспериментальное подтверждение. Работа прошла широкую апробацию на научных семинарах как в РФ, так и за рубежом.

### **Научная и практическая значимость полученных результатов**

Существенная часть работ М.А. Семиной выполнена совместно с экспериментаторами, сравнение теоретических и экспериментальных результатов является сильной стороной этой диссертации. Полученные результаты – оригинальный метод построения пробных функций, расчеты экситонных, трионных, биэкситонных состояний, теория ряда физических эффектов, представляют несомненный интерес для организаций, занимающихся исследованием кулоновских и оптических явлений в кристаллах и наноструктурах, а также изучающих ридберговские состояния вещества таких как СПбГУ, МГУ, ФИАН, ИОФАН, НИЦ «Курчатовский институт», ИФП СО РАН, ИМФ РАН. Все это определяет **научную и практическую значимость** представленной диссертационной работы.

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, 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.).

Диссертация Марины Александровны Семиной написана ясным языком и хорошо иллюстрирована. В ней четко сформулированы цели исследования, рассмотрены физические явления, наблюдения которых можно было ожидать в исследованных структурах, достаточно полно описаны и проанализированы использованные теоретические методы и обсуждены полученные результаты.

Таким образом актуальность исследований, новизна, достоверность и практическая значимость выводов, сделанных в диссертационной работе М.А. Семиной, не вызывают сомнений.

### **Замечания по содержанию диссертации:**

Существенных замечаний, которые бы поставили под сомнение основные выводы диссертационной работы, у нас не имеется. Следующие замечания носят методический или дискуссионный характер.

- 1). На стр. 24 - «Кулоновское отталкивание между носителями заряда одного знака (двумя электронами или двумя дырками) описывается эффективным потенциалом, подобным (1.7)». Потенциал (1.7) является чисто кулоновским. Что можно сказать об обменном взаимодействии, им пренебрегается?

2) На протяжении всего текста диссертации автор противопоставляет вариационный метод решения задачи более трудоемкому методу, основанному на прямой диагонализации матрицы Гамильтона. Хотелось бы обратить внимание, что метод, который основан на разложении волновой функции по базису, что приводит к задаче на собственные значения матрицы гамильтониана, также является вариационным. Это, так называемый, линейный вариационный принцип Ритца.

3) На стр. 56 в формуле (1.71) волновая функция основного состояния электронной подсистемы представлена в виде произведения  $N$  одночастичных функций, зависящих только от пространственных координат. Эта функция удовлетворяет принципу Паули? Почему не учтена антисимметризация с учетом спиновых переменных?

4) На стр. 59 отмечено, что вариационные параметры в формуле (1.79) имеют ясный физический смысл. Однако объяснение этому факту является слишком кратким и непонятным. Имело бы смысл дать более подробную физическую интерпретацию формул (1.78) и (1.79), если таковая существует.

5) На стр. 230 в формуле (5.8) для величина квантового дефекта в знаменателе находится величина спин-орбитального расщепления. Есть ли какое-то физическое объяснение этому факту? Если формула (5.8) работает в широком диапазоне, было бы странно обнаружить бесконечный рост квантового дефекта при стремлении спин-орбитального расщепления к нулю. Иными словами, формула (5.8) не имеет нерелятивистского предела.

6) Непонятным выглядит утверждение о том что «основной вклад в квантовые дефекты в кристаллах вносит сложная структура валентной зоны закиси меди, спин-орбитальная связь ...». Обращает на себя внимание, что величина квантового дефекта согласно формуле (7) автореферата и (5.8)

диссертации содержит только индекс  $l$  (орбитальное квантовое число) и поэтому квантовый дефект получается одинаковым для разных компонент спин-орбитального расщепления. Как этот факт коррелирует с важной ролью спин-орбиты?

Тем не менее, сделанные замечания не снижают высокой научной значимости проведенных исследований и общей высокой оценки диссертационной работы.

Выступление М.А. Семиной по материалам диссертационной работы было заслушано и обсуждалось на совместном научном семинаре кафедры квантовой механики и кафедры физики твердого тела СПбГУ. Диссертационная работа М.А. Семиной в целом производит очень хорошее впечатление. Научные положения и результаты диссертации хорошо аргументированы и обоснованы. Основные результаты работы полностью отражены в публикациях в авторитетных российских и международных журналах, докладывались на основных российских и международных конференциях, хорошо известны специалистам в нашей стране и за ее пределами. Автореферат правильно и достаточно полно отражает содержание диссертационной работы.

**Заключение по работе.** Диссертация, А.М. Семиной «Теория кулоновских комплексов в полупроводниках и наносистемах», представляет завершённую научно-квалификационную работу, полностью отвечающую критериям, предъявляемым к докторским диссертациям, действующим «Положением о присуждении ученых степеней» ФТИ им. А.Ф. Иоффе. По нашему убеждению, автор диссертационной работы – Семина Марина Александровна, безусловно, заслуживает присуждения ей степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика.

Отзыв ведущей организации на докторскую диссертацию Марины Александровны Семиной подготовлен профессором кафедры квантовой

механики СПбГУ, доктором физ.-мат. наук И.И. Тупицыным.

Диссертационная работа и настоящий отзыв рассмотрены и утверждены на научном семинаре кафедры квантовой механики физического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» 21.02.2020, протокол № 88.08/3-04-3.

Заведующий кафедрой  
квантовой механики

ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский  
государственный университет»  
д. физ-мат. наук, профессор

В.М. Шабает

Адрес: Российская Федерация, 199034 Санкт-Петербург,

Университетская наб., д. 7/9

Тел. +7 (812) 328-20-00

Эл. почта: [spbu@spbu.ru](mailto:spbu@spbu.ru)