

Отзыв официального оппонента на диссертационную работу Семиной Марины Александровны «ТЕОРИЯ КУЛОНОВСКИХ КОМПЛЕКСОВ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ И НАНОСИСТЕМАХ», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.02 - теоретическая физика

В физике твердого тела свойства дефектов играют ключевую роль как в фундаментальной смысле, так и в прикладном отношении. Все совершенные кристаллы одного химического состава были бы неотличимы, если бы не содержали дефекты и в этом смысле физика дефектов неотделима от физики твердого тела. Кроме того, поскольку эффективные массы носителей заряда могут оказаться значительно меньше, чем масса свободного электрона, а диэлектрическая проницаемость существенно превосходит единицу, то эффективная энергия Бора оказывается много меньше, чем для атома водорода в вакууме. Это позволяет в кристаллах моделировать различные физические ситуации, например, поведение атома водорода во внешних полях, без приложения гигантских магнитных полей. Прикладной интерес к примесям в кристаллах связан с тем, что функционирование большого числа твердотельных устройств обусловлено именно примесями. Новый импульс к развитию физики дефектов был вызван синтезированием низкоразмерных систем, в которых обнаружились особенности взаимодействия носителей заряда, обусловленные ограничением их движения в одном или нескольких направлениях. Это также поставило ряд задач перед теорией. Целью диссертации является теоретическое исследование различного типа кулоновских комплексов-от нейтральных и заряженных экситонов до и трионов и их влияние на оптические свойства полупроводников и полупроводниковых наносистем. Таким образом развитие теории примесей в полупроводниках представляется **актуальной и практически важной** задачей. Диссертация состоит из Введения, пяти глав, Заключение и списка литературы. Она содержит 310 страниц текста, включая 70 рисунков и 9 таблиц. Список цитируемой литературы содержит 402 наименования. Во Введении обоснована актуальность темы исследований, сформулированы цель и научная новизна работы, перечислены основные положения, выносимые на защиту. В первой главе диссертации разработан вариационный подход, особенностью которого является выбор пробных функций, дающих физически наглядную картину строения нейтральных и заряженных экситонов В гл. 1 используется модель стандартных параболических зон, случай состояний типа  $\Gamma_8$  изучается в других главах. Первый параграф - обзорный, во втором изучены экситоны и трионы в цилиндрически-симметричных квантовых проволоках. Третий посвящен теории кулоновских комплексов в квазидвумерных структурах с пространственным разделением заряда. Благодаря скрытой симметрии

кулоновского или параболического потенциала, в таких задачах имеется дополнительное (случайное) вырождение энергетических уровней. Показано, что двумерные кулоновский и двумерный параболический потенциалы возникают как естественные предельные случаи в задаче о пространственно-непрямом экситоне или электроне, взаимодействующим с донором в барьере. Четвертый параграф посвящен разработке универсального метода построения пробной функции для вычисления энергии связи кулоновского электрон-дырочного комплекса, локализованного на неоднородности интерфейса квантовой ямы или квантовой проволоки. В главе 2 предложена теория локализации дырок в наноструктурах с учетом сложной структуры валентной зоны, как в нулевом магнитном поле, так и во внешнем поле. Первый параграф обзорный, в нем описана модель сложной зоны типа  $\Gamma_8$ , которая будет использоваться в дальнейшем. Во втором параграфе разработана теория акцепторной примеси в наноструктурах и сделан вывод о возможности немонотонной зависимости энергии связи дырки на центре от ширины ямы или радиуса проволоки. В параграфе 3 развита теория эффекта Зеемана для дырок в наноструктурах с модельным анизотропным параболическим потенциалом. Выбор параболического потенциала обусловлен физической разумностью и тем, что его использование облегчает техническую сторону расчетов. Для расчета энергетического спектра дырки в магнитном поле проводилась численная диагонализация матрицы гамильтониана дырки. В таком подходе учитывается как эффект Зеемана – линейное по полю расщепление и смешивание дырочных уровней, так и диамагнитный эффект поля, приводящий к изменению потенциала размерного квантования. В завершающем параграфе приведены основные результаты данной главы.

В Главе 3 методы, развитые ранее, использованы для теоретического описания дырочных, экситонных и биэкситонных состояний в квантовых точках с плавным потенциальным профилем. Такие объекты возникают в эпитаксиальных и коллоидных квантовых точках. Основной акцент делается на квантовые точки II-VI, чей гетеропотенциал адекватно описывается параболическим или гауссовым профилем. Результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными гетероструктур  $\text{CdSe}/\text{Zn}(\text{S},\text{Se})$ , особенности роста которых позволяют с приводят к относительно плавному потенциалу. В шестом параграфе главы на основании развитой теории объясняются особенности экситонной фотолюминесценции из массивов эпитаксиальных квантовых точек  $\text{CdSe}$ . Интрига раздела состоит в том, согласно литературным данным линия фотолюминесценции имеет сравнительно небольшую ширину  $40\div 60 \text{ meV}$  при низких температурах, характерную для относительно узкого распределения квантовых точек по размерам и составу. С другой стороны из опубликованных данных известно,

что эти структуры характеризуются большим разбросом параметров точек, как по размерами, так и содержанием кадмия. В диссертации на основе расчета уровней энергии электронов и дырок в сферических квантовых точках с гауссовым потенциальным профилем с учетом анизотропии точек показано, что резонансный перенос энергии от маленьких точек к большим приводит как к сужению линии фотолюминесценции, так и к смещению пика в спектре при понижении энергии возбуждения. Это объясняет экспериментальные данные и снимает противоречие. (Такой перенос энергии носит название ферстеровский резонансный перенос). Четвертая глава диссертации посвящена расчету экситонов и трионов в новом классе квазидвумерных или двумерных систем, состоящих из чередующихся слоев диалкогогенидов переходных металлов  $\text{MX}_2$  (полупроводники) и гексагональных слоев нитрида бора. Особенностью таких систем является существенный диэлектрический контраст, который приводит существенному отличию закона взаимодействия носителей заряда от кулоновского и существенной роли сил изображения. Показано, что в системах с двумя слоями  $\text{MX}_2$  отличия потенциала взаимодействия от кулоновского приводит к отличию экситонной серии от водородоподобной. Результаты теории сопоставляются с результатами экспериментов (университет города Тулузы, группа проф. Кс. Мари) и демонстрируется их хорошее согласие. В заключительном параграфе главы построена теория эффекта Парселла на экситонах в ван-дерваальсовых гетероструктурах. Показано, что интерференция света при многократном отражении от монослоя и интерфейсов в типичных ван-дер-ваальсовых гетероструктурах приводит к значительным изменениям силы осциллятора экситона. Последняя глава 5 диссертации содержит результаты теоретических исследований экситонов в кубических кристаллах. Мотивация этих исследований обусловлена недавними экспериментальными исследованиями, выполненными в группе М. Байера (Дортмунд, Германия) на закиси меди. Ожидалось, что кубическая симметрия кристалла позволит описать возбужденные состояния экситона в рамках водородоподобной схемы, однако стороны прецизионные измерения обнаружили отклонения от водородоподобного описания и это потребовало создание теории высоковозбужденных экситонных состояний в объемных кристаллах с учетом особенностей зонной структуры. Во втором параграфе приведены результаты тонкой структуры экситонных состояний в закиси меди и показано, согласие теории и эксперимента. Важным моментом при сравнении расчетов с экспериментальными данными является отсутствие подгоночных параметров в теории, все необходимые данные для расчета спектров брались из известных источников.

При изучении работы возникло несколько замечаний. Первое связано с учетом сил изображения. В некоторых главах они принимаются во внимание,

в некоторых нет и не указаны оценки, когда эти силы не существенны. В случаях, когда силу изображения существенны, не оценен их вклад в обменное взаимодействие носителей заряда в трионах. Второе техническое-при учете состояний  $d$  типа, пробная волновая функция выбирается, пропорциональная радиусу в первой степени, хотя более естественной выглядело бы вторая степень. В ранних расчетах энергии связи акцептора так и поступали. При расчете энергии взаимодействия носителей заряда по закону Келдыша-Рытовой иногда удобно пользоваться Фурье-образом этого потенциала. Эти замечания связаны с тем, что диссертационная работа имеет существенный методический характер. Эти замечания не влияют на общее высокую оценку работы. Методический характер работ представляется, важным достижением автора. В целом, в работах, вошедших в диссертацию выполнено оригинальное теоретическое исследование, внесшее **существенный вклад** в теорию конденсированного состояния. Автореферат правильно отражает содержание работ. Семина неоднократно выступала на международных и российских конференциях с приглашёнными лекциями, результаты работ докладывались на семинарах. Представленная работа полностью соответствует требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям по «Положению о присуждении ученых степеней» ФТИ им. А.Ф. Иоффе на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика, а её автор Семина Марина Александровна присуждения ей степени доктора физико-математических наук.

Официальный оппонент

доктор физ.-мат.наук, профессор,  
заведующий сектором

Н.С.Аверкиев

Место работы: ФТИ им.А.Ф.Иоффе

Тел.+78122927155, адрес электронной почты  
averkiev@les.ioffe.ru

Ученый секретарь ФТИ им.А.Ф.Иоффе

кандидат физ.-мат.наук

М.И.Патров