

Отзыв официального оппонента
Гиппиуса Николая Алексеевича о диссертационной работе
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 диссертации М.А. Семиной развита теория электрон-дырочных комплексов: экситонов, трионов, биэкситонов в широком круге полупроводниковых систем, включая структуры с квантовыми ямами, проволоками и точками, с монослойными полупроводниками, а также в объемных кристаллах.

Актуальность. В формировании оптических свойств объемных полупроводников, а также полупроводниковых наносистем, как правило, главную роль играют кулоновские комплексы с малым числом частиц: экситоны, трионы или заряженные экситоны, экситонные молекулы – биэкситоны. Несмотря на то, что экситон большого радиуса был экспериментально открыт в закиси меди почти 70 лет тому назад, развитие экспериментальных методик, полупроводниковых нанотехнологий, появление новых материальных систем с необычными и экстремальными физическими свойствами ставят новые задачи к теории. Среди последних – описание высоковозбужденных или, как их еще называют, ридберговских состояний экситонов и их отклика на внешние воздействия, развитие теории экситонов и трионов, тонкой структуры их энергетического спектра и эффектов светоэкситонного взаимодействия в структурах с экстремальной двумерностью, развитие методов расчета энергий связи и волновых функций кулоновских комплексов, локализованных в нанокристаллах, квантовых точках, ямах и проволоках. Диссертация М.А. Семиной посвящена именно этому кругу вопросов и, несомненно, является актуальной, своевременной и востребованной.

Научная новизна и практическая значимость диссертационной работы заключается в развитии и апробации вариационного метода для расчета состояний электрон-дырочных комплексов в полупроводниковых системах различной размерности, включая нульмерные, одномерные и двумерные системы; разработке теории локализации носителей заряда и эффекта Зеемана в случаях, когда имеется орбитальное вырождение зон; развитии теории нейтральных и заряженных экситонов в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах на основе монослоев дихалькогенидов переходных металлов; развитии теории светоэкситонного взаимодействия в таких

системах; разработке теории ридберговских состояний экситонов в объемных полупроводниковых кристаллах и применении этой теории к описанию экспериментов по оптической спектроскопии закиси меди.

М.А. Семиной получен значительный набор новых и оригинальных научных результатов, среди которых хотелось бы выделить следующие:

Автором в первой главе диссертации предложен метод построения вариационных функций, пригодных для описания электрон-дырочных комплексов с малым числом частиц в широком круге наносистем. Анализ предельных случаев, позволяющих выделить «быстрые» и «медленные» степени свободы (например, относительное движение носителей заряда в комплексе и движение центра масс, или движение электронов и движение дырок), и оригинальная процедура построения интерполирующей между этими предельными случаями функции, позволяют рассчитывать энергии связи и оценивать строение кулоновских комплексов с умеренными вычислительными затратами. В рамках развитого подхода показано, что наблюдаемое в экспериментах увеличение энергий связи экситонов и трионов по сравнению с расчетами для идеализированных квазиодномерных и двумерных систем может быть связано с локализацией кулоновских комплексов на неоднородностях исследуемых структур.

Во второй главе диссертации построена теория локализации дырок в наноструктурах в рамках модельного гамильтониана Латтинжера. На примере простейшего кулоновского комплекса – акцепторной примеси – показано, что энергия связи может меняться немонотонно при переходе от объемной системы к двумерной или одномерной. Детально проанализировано зеемановское расщепление дырки в наноструктурах, обусловленное конкуренцией спин-орбитального взаимодействия и эффекта локализации, который приводит к снятию четырехкратного вырождения дырочных состояний.

Общие методы и подходы, развитые в первых двух главах диссертации М.А. Семина успешно применяет в последующих главах к конкретным полупроводниковым системам, причем основной акцент делается, с одной стороны, на сопоставление развиваемых теоретических моделей с экспериментальными данными, а с другой – на поиск и изучение новых эффектов, присущих тем или иным полупроводникам или полупроводниковым низкоразмерным системам. Так, в третьей главе диссертации развивается теория кулоновских комплексов в наносистемах на основе полупроводников II-VI. Результаты расчетов эффекта Зеемана на дырках в таких системах сопоставляются с данными экспериментов, выполненных в Техническом университете Дортмунда (Германия). Приводятся результаты моделирования экситонных состояний в квантовых точках CdSe, позволяющие

описать особенности фёрстеровского переноса энергии в массивах таких точек, наблюдавшиеся в ФТИ им. А.Ф. Иоффе.

Четвертая глава диссертации содержит результаты теоретических исследований нейтральных и заряженных экситонов в весьма популярной в последнее время системе – ван-дер-ваальсовых гетероструктурах на основе монослоев дихалькогенидов переходных металлов. Помимо существенных эффектов спин-орбитального взаимодействия и многодолинной структуры спектра, наличие диэлектрического контраста в системах с экстремально-двумерными полупроводниками приводит как к существенным отличиям экситонной серии от водородоподобной, так и к необычным интерференционным эффектам в оптическом отклике таких систем. Несмотря на то, что на особенности экранировки кулоновского взаимодействия в двумерных системах обращали внимание еще Н.С. Рытова и Л.В. Келдыш в 1960-е и 70-е годы, именно в монослоях дихалькогенидов переходных металлов, как показано в диссертационной работе, такие эффекты проявляются наиболее ярко. Теоретические работы, выполненные автором, проводились в тесном контакте с экспериментаторами. В частности, было проверено предсказание автора о том, что за счет эффекта Парселла в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах имеется возможность модуляции времени жизни экситона на порядок величины за счет изменения толщин слоев диэлектрика, окружающих монослой.

Несмотря на то, что концепция экситона является хорошо установленной до последних лет оставался открытым вопрос о том, насколько можно продвинуться в изучении серии водородоподобных состояний в сторону высоковозбужденных состояний. Развитие методов оптической спектроскопии позволило наблюдать экситонную серию в классическом полупроводнике Cu_2O вплоть со состояний с главным квантовым числом 25, размер которых достигает микрометров. Теории таких ридберговских экситонов посвящена пятая глава диссертационной работы. В частности, развита теория тонкой структуры экситонных состояний и показано, что помимо P -состояний экситонов в однофотонных дипольных переходах могут участвовать и другие экситоны с нечетными огибающими, в частности, F -экситоны, проявляющиеся в виде триплетов в спектре пропускания. Предложен эффективный гамильтониан, позволяющий описать экситонные состояния с большим главным квантовым числом, учитывающий по теории возмущений эффекты кристаллического окружения и обменного взаимодействия. Это позволило обосновать применение концепции квантовых дефектов, широко используемой в атомной физике, для описания ридберговских экситонов несмотря на то, что физические причины возникновения квантовых дефектов в полупроводниках и в физике атомов могут существенно отличаться.

Достоверность результатов, полученных в диссертации, несомненна. Это обусловлено внутренней непротиворечивостью результатов, использованием совершенного аппарата теоретической и математической физики, широкого сопоставления результатов, получаемых различными методами расчета, а также сопоставления модельных результатов с данными экспериментов.

Научная и практическая значимость диссертационной работы. В работе развит вариационный метод для расчета состояний электрон-дырочных комплексов в полупроводниковых системах различной размерности; разработана теория локализации носителей заряда и эффекта Зеемана в “сложной” валентной зоне; построена теория экситонов и трионов в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах на основе монослоев дихалькогенидов переходных металлов; разработана теория эффекта Парселла на экситонах в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах и теория ридберговских состояний экситонов в объемных полупроводниковых кристаллах. Результаты работы могут быть востребованы для квантовомеханической инженерии электронных состояний и разработке наноструктур с заданными оптическими свойствами, а также важны с фундаментальной точки зрения.

Как и всякий труд такого объема диссертация М.А. Семиной не свободна от недостатков. Имеются следующие несущественные *замечания*:

1. При описании эффекта Зеемана в “сложной” валентной зоне спин-орбитальное взаимодействие, по существу, учитывается в два этапа: один раз в члене $\sim \lambda \text{карра} (J V)$, где J - оператор момента $3/2$ дырки (который получился в результате суммирования спина электрона и орбитального момента блоховских функций), а второй раз - при подстановке $p \rightarrow p - (e/c)A$ в гамильтониан Латтинжера. Возможно ли получить эти два вклада в едином подходе?

2. В диссертации не обсуждается, чем определяется ширина экситонных резонансов в спектре пропускания закиси меди и имеется ли для нее скейлинговая закономерность с номером резонанса?

3. В четвёртой главе, при рассмотрении экситонов в двухслойных структурах на основе MX_2 с учетом диэлектрического контраста используется локальное приближение для диэлектрической восприимчивости рассматриваемой структуры. Такое приближение для систем, состоящих из нескольких атомарных слоёв, заслуживает чуть более подробного обсуждения, поскольку радиус нелокальности функции отклика оказывается порядка толщины слоя и взаимодействие носителей на малых расстояниях может отличаться от результатов рассмотренной локальной модели.

Эти замечания не несут принципиального характера и не снижают общую высокую оценку работы.

В целом диссертационная работа М.А. Семиной «Теория кулоновских комплексов в полупроводниках и наносистемах» заслуживает самой высокой оценки благодаря ее высокому научному уровню, новизне результатов, ясности изложения. Одним из важнейших достоинств работы является тесное сотрудничество автора с экспериментаторами – многие из теоретических результатов нашли экспериментальное подтверждение.

Работы М.А. Семиной известны специалистам по ее выступлениям с докладами, включая приглашенные, на международных и российских конференциях и семинарах, публикациях в высокорейтинговых журналах, они цитируются в научной литературе.

Диссертация М.А. Семиной является законченным исследованием, имеющим важное научное и прикладное значение для физики. Таким образом, диссертационная работа М.А. Семиной полностью удовлетворяет всем 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 несомненно заслуживает присуждения ей искомой ученой степени.

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

Официальный оппонент:
доктор физико-математических наук,
профессор Центра фотоники и квантовых материалов
АНОО ВО "Сколковский институт науки и технологий"

Гиппиус Николай Алексеевич

143026, Москва,
территория инновационного центра Сколково, ул. Нобеля, д. 3
Телефон: +7 910 4053378, e-mail: n.gippius@skoltech.ru

Подпись Гиппиус Н.А. подтверждаю