



МИНОБРНАУКИ РОССИИ

федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Санкт-Петербургский политехнический
университет Петра Великого»
(ФГАОУ ВО «СПбПУ»)

ИНН 7804040077, ОГРН 1027802505279,
ОКПО 02068574

Политехническая ул., 29, Санкт-Петербург, 195251
тел.: +7(812)297 2095, факс: +7(812)552 6080
office@spbstu.ru

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе
ФГАОУ ВО «СПбПУ», доктор
физико-математических наук, член-
корреспондент Российской академии
наук, профессор

_____Сергеев В.В.

«___» _____ 2020 года

ОТЗЫВ

ведущей организации – федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» – на диссертацию **Белолипецкого Алексея Владимировича на тему: «Моделирование электронных состояний в кремниевых, германиевых и германий-кремниевых нанокристаллах»**, представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – Физика полупроводников

Актуальность работы

Тема диссертационной работы связана с разработкой теоретических подходов к построению модели электронных и дырочных состояний в нанокристаллах на основе германия и кремния, внедренных в матрицу аморфного материала. Автор использует для проведения своего исследования модель сильной связи, которая зарекомендовала себе как эффективный инструмент для исследования особенностей энергетического спектра различных материалов и была неоднократно успешно использована для решения подобных задач. Однако ее применение к рассматриваемым в работе объектам является

далеко не тривиальным вопросом, что, несомненно, требует проведения дополнительных и весьма обширных исследований в данной области физики полупроводников.

Кремний, в связи с его использованием в качестве основного материала современной микроэлектроники, является наиболее изученным полупроводником. По этой причине все параметры носителей заряда в данном материале известны уже достаточно давно и с большой точностью. Последнее касается и свойств другого сходного полупроводника, использованного в работе – германия. Однако бурное развитие нанoeлектроники, произошедшее в последние годы, существенно расширило круг объектов, которые могут быть использованы в качестве потенциальных элементов при проектировании приборов опто- и нанoeлектроники нового поколения. Переход к использованию наноматериалов привел к необходимости принципиального изменения методов теоретических подходов к расчету их различных параметров и, в более общем смысле, к анализу их свойств, что связано, в первую очередь, с необходимостью учета эффекта размерного квантования. При этом для большинства основных представителей класса наноматериалов – полупроводниковых гетероструктур, квантовых ям, нитей и точек – существующие теоретические методы позволяют достаточно легко проводить необходимые расчеты энергетического спектра и параметров носителей заряда. Однако в последние годы резко увеличился интерес к свойствам нанокomпозитных материалов, в частности, к структурам, в которых нанобъекты различного типа расположены внутри материала, обладающего принципиально иными свойствами. Одним из таких объектов являются структуры, в которых нанокристаллы внедрены в аморфную матрицу. С одной стороны, это позволяет избежать ряда паразитных эффектов, связанных с воздействием окружающей среды на свойства нанокристаллического объекта, и, тем самым, расширить область потенциального практического использования подобных структур. С другой стороны, наличие матрицы оказывает влияние на свойства и параметры носителей заряда в нанокристаллах, что приводит к необходимости существенной модификации методов теоретического расчета свойств подобных структур. Развитие таких методов является несомненно

необходимым шагом на пути к разработке и созданию новых и перспективных полупроводниковых приборов.

Таким образом, возникшие в последние годы задачи, связанные как с исследованиями особенностей свойств наноматериалов, так и с их практическим использованием, требуют развития новых методов, позволяющих проводить теоретическое моделирование свойств нанокристаллов различного типа и, как следствие, расчет параметров нанокристаллических структур, имеющих перспективы практического использования в качестве рабочих элементов приборов современной наноэлектроники.

Представленная диссертационная работа посвящена разработке одного из таких методов, его апробации в применении к описанию свойств трех типов нанокристаллов, внедренных в матрицу оксида кремния и гидрогенизированного аморфного кремния, и получению на основе проведенных исследований новых данных об особенностях физических свойств рассматриваемых объектов и их параметрах, актуальных для различных оптоэлектронных применений.

Все сказанное выше позволяет сделать вывод, что тема диссертационной работы Алексея Владимировича Белолипецкого является несомненно актуальной.

Новизна исследований и полученных результатов

Научная новизна результатов диссертационной работы заключается, в первую очередь, в следующем:

1. Автором последовательно развит и применен к анализу свойств нанокристаллов различного типа, внедренных в аморфную матрицу, теоретический подход, основанный на использовании модели сильной связи и метода виртуального кристалла. В рамках данного подхода получены непротиворечивые результаты о свойствах исследуемых объектов, в том числе и соответствующие имеющимся экспериментальным данным. Это позволяет расценивать предложенный в работе метод расчета как вполне адекватный и позволяющий достоверно определять параметры, характеризующие состояния носителей заряда в исследованных объектах.

2. Показано, что использование матрицы оксида кремния в качестве окружения кремниевых нанокристаллов позволяет увеличить сечение оптического поглощения рассматриваемых структур по сравнению с одиночными нанокристаллами.

3. Методом теоретического моделирования найдена частотная зависимость сечения бесфононного оптического поглощения для кремний-германиевых нанокристаллов, внедренных в матрицу оксида кремния.

4. Предложена модель, описывающая механизм безизлучательной рекомбинации носителей заряда в кремниевых нанокристаллах, внедренных в матрицу гидrogenизированного аморфного кремния, результат расчета по которой качественно соответствует экспериментальным данным, полученным для таких структур.

Обоснованность и достоверность научных положений и выводов

Достоверность и обоснованность научных положений, выводов и рекомендаций, содержащихся в диссертации, подтверждается примененным автором методом исследования, заключающимся в использовании в качестве основы для проведения теоретического моделирования надежного и общепризнанного метода сильной связи, а также известного метода виртуального кристалла; систематическом характере проведенных исследований, основанных на применении предложенного единого подхода в описанию свойств нанокристаллических структур различного состава; сравнении, где это возможно, полученных автором расчетных результатов с имеющимися экспериментальными данными.

Практическая ценность работы заключается в следующем:

1. Разработан метод теоретического моделирования электронных и дырочных состояний, возникающих в структурах, содержащих полупроводниковые нанокристаллы, внедренные в аморфную матрицу, который может быть применен для проведения аналогичных расчетов для структур различных составов.

2. Продемонстрирована возможность улучшения оптических характеристик полупроводниковых наноструктур за счет использования аморфной матрицы определенного состава, окружающей внедренные в нее нанокристаллы.

Рекомендации для использования результатов и выводов диссертационной работы

Полученные в работе результаты и развитые подходы могут быть использованы при теоретическом исследовании наноструктур и наноматериалов различного типа, а также при разработке в дальнейшем приборов опто- и наноэлектроники нового поколения в различных научно-исследовательских и производственных организациях, среди которых можно выделить такие как Институт физики микроструктур РАН, Санкт-Петербургский НИУ информационных технологий, механики и оптики, ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Институт физики твердого тела РАН, Санкт-Петербургский государственный университет, Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Академический университет им. Ж.И. Алфёрова, Новосибирский государственный технический университет и др.

Общая оценка диссертационной работы

Диссертационная работа выполнена на актуальную тему, связанную с развитием метода теоретического моделирования свойств носителей заряда в нанокристаллах, внедренных в аморфную матрицу, и представляющую в настоящее время как научный, так и практический интерес. Автором применены надежные методы расчета и моделирования изучаемых свойств, обобщены результаты всех проведенных исследований, четко сформулированы и обоснованы основные научные выводы диссертационной работы.

Замечания по диссертационной работе

Несмотря на в целом положительное мнение о диссертации, к ней имеются некоторые вопросы и замечания:

1. При моделировании автором осуществлен подбор параметров модели сильной связи для виртуального кристалла оксида кремния. В диссертации указано, что эти параметры подбирались таким образом, чтобы воспроизвести зонную структуру α -кристоболита. Однако количество этих параметров очень велико (см. табл. 1.1, табл. 2.1), а зонный спектр при их использовании воспроизводится далеко не полностью (см. рис. 1.2). Не ясно, какие количественные критерии использовались автором при выборе указанных параметров и насколько однозначен этот выбор.

2. В работе задается шарообразная форма нанокристаллов. Возникает вопрос, влияет ли возможное изменение этой правильной геометрической формы, а также дисперсия в размере различных внедренных нанокристаллов, что очевидно должно реализовываться в реальных структурах, на результаты проведенных расчетов.

3. В главе 1 проведен расчет сечения поглощения для нанокристаллов кремния в матрице аморфного оксида кремния, сравнение результатов которого с экспериментальными данными (см. рис. 1.11) используется автором в качестве доказательства правомерности полученных им результатов. Автору следовало бы более подробно описать представленные на рис. 1.11 результаты. Спектр поглощения выглядит достаточно нестандартно, в нем хорошо видно наличие нескольких особенностей, наблюдаемых при различных значениях энергии фотона. Хотелось бы понять, с какими конкретно электронными переходами в использованной автором зонной структуре исследуемого материала связаны эти особенности.

4. На рис. 1.10 и рис. 2.6 автором приведены рассчитанные распределения локальной плотности электронных состояний в Si и Si/Ge нанокристаллах в матрице SiO₂. Хорошо видно, что заметное значение плотности состояний наблюдается на расстояниях, заметно превышающих размеры соответствующих нанокристаллов, при этом падения этого значения до нуля в ряде случаев не происходит. В чем причина подобного распределения?

5. При расчете резонансного туннелирования электронов в структурах с нанокристаллами кремния в матрице аморфного кремния (раздел 3.2.3 диссертационной работы) автором вместо δ -функции использовался лоренциан с полушириной, равной 5 мэВ. В работе не указано, чем определялось именно такое значение разброса энергии.

Указанные недостатки не являются принципиальными, не противоречат всем основным результатам и выводам, сформулированным в работе, и не уменьшают, тем самым, научную значимость проведенного А.В. Белолипецким исследования.

Апробация работы

Все основные результаты проведенных автором исследований, представленные в диссертационной работе, опубликованы в 7 научных статьях в реферируемых журналах, входящих в перечень ВАК и индексируемых в международных научных базах (Scopus, Web of Science). Результаты работы представлялись на достаточно большом числе российских и международных научных конференций по ее тематике, проведенных в 2013-2019 гг., а также докладывались на ряде научных семинаров. Автореферат диссертации правильно и достаточно полно отражает содержание диссертационной работы и соответствует ее основным положениям.

Заключение

Диссертационная работа Белолипецкого Алексея Владимировича на тему: «Моделирование электронных состояний в кремниевых, германиевых и германий-кремниевых нанокристаллах», представленная на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников, является законченной научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований решена научная проблема, имеющая существенное значение для современной физики полупроводников – предложен, обоснован и апробирован метод теоретического

моделирования свойств носителей заряда в наноструктурах, содержащих нанокристаллы различного типа, внедренные в аморфную матрицу.

Уровень диссертации соответствует всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а соискатель, Белолипецкий Алексей Владимирович, заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников.

Отзыв рассмотрен и утвержден на заседании Высшей инженерно-физической школы, протокол № 12 от 28 октября 2020 г.

Отзыв подготовил:

доктор физико-математических наук (01.04.10)

профессор Высшей

инженерно-физической школы

В.Э. Гасумянц

Председатель заседания:

директор Высшей инженерно-физической школы,

доктор физико-математических наук (01.04.04),

доцент

В.В. Журихина

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

Адрес: 195251 Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.

Телефон: +7 (812) 775-05-30

E-mail: office@spbstu.ru