

ОТЗЫВ

официального оппонента Бурдова Владимира Анатольевича, доктора физико-математических наук, доцента, заведующего кафедрой теоретической физики федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского» (адрес: 603950, Нижний Новгород, пр. Гагарина 23; телефон: +7 831 4623304; e-mail: burdov@phys.unn.ru)

на диссертацию Белолипецкого Алексея Владимировича
"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

Диссертация А.В. Белолипецкого представляет собой теоретическое исследование электронных, оптических и транспортных свойств кремниевых нанокристаллов и нанокластеров на основе германий-кремниевых растворов. За последние примерно три десятилетия различные аспекты этих проблем интенсивно изучались как теоретически, так и экспериментально. Так, первоначально, большие усилия исследователей были сосредоточены на получении интенсивного излучения, оптического усиления, стимулированной эмиссии и достижении высокой квантовой эффективности фотонной генерации в кремниевых нанокристаллах. Для реализации этих целей предлагались различные способы модификации электронной структуры нанокристаллов, которые бы позволили устранить, хотя бы частично, основное препятствие на этом пути – непрямозонность кремния, являющееся фундаментальной проблемой на пути внедрения кремния, или структур на его основе, в элементную базу оптоэлектроники. Эти исследования продолжаются и сейчас. Позднее, стал проявляться интерес к кремниевым нанокристаллам, связанный с иными возможными направлениями их использования – такими, например, как фотовольтаика или биомедицина. На этих путях уже достигнут значительный прогресс, и в настоящее время исследования в этих направлениях ведутся очень активно. В последние годы также заметно вырос научный интерес к германиевым или кремний-германиевым структурам и, в частности, нанокластерам на основе сплава кремния с германием. Германий имеет меньшую ширину запрещенной зоны по сравнению с кремнием и, кроме того, непрямозонность в германии выражена не столь сильно, как в кремнии. Соответственно, замещение атомами германия атомов кремния в нанокластере можно рассматривать как эффективный способ варьирования ширины оптической щели и излучательной способности нанокластера. Вместе с тем, германий сравнительно легко может быть встроен в кремниевую технологию, поэтому интенсивные исследования структур на основе германия или кремний-германиевого раствора, проводимые в последние годы, видятся вполне

естественными. Диссертационная работа А.В. Белолипецкого находится в русле этих исследований, и потому ее тема представляется вполне актуальной.

Очевидно, исследование и понимание физических процессов, происходящих в кремний-германиевых наноструктурах вообще, и, в частности, в рассматриваемых в работе кремниевых и кремний-германиевых нанокластерах, является необходимым для успешного продвижения этих систем в различные приборные, в том числе оптические, приложения. Этим определяется практическая значимость диссертационного исследования.

Главная особенность представленной работы, выделяющая ее из большого числа работ по этой (или схожей) тематике и определяющая ее принципиальную новизну, заключается в последовательном и детальном (насколько это возможно в рамках используемых подходов) учете влияния матрицы, окружающей нанокристаллы, на электронные состояния в них. Так, в первой и второй главах исследовались состояния в кремниевых нанокристаллах и кремний-германиевых нанокластерах, находящихся в матрице диоксида кремния, которая моделировалась своим кубическим кристаллическим политипом β -кристобалита. Использование модели сильной связи при расчетах позволило учесть реальную структуру диэлектрического окружения и естественным образом определить волновые функции электронов и дырок во всем пространстве – внутри нанокристалла и за его пределами (в матрице). В третьей главе изучался электронный транспорт в системе кремниевых нанокристаллов в матрице аморфного кремния. В этом случае оказывалась принципиально важной электронная структура хвостовых состояний в матрице, через которые и осуществлялся перенос электрического заряда. В диссертации была предложена адекватная модель этих состояний и получены вероятности электронных переходов из нанокристалла на хвостовое состояние в матрице и между хвостовыми состояниями.

Результаты, полученные в работе, – достоверны. Они внутренне непротиворечивы и физически понятны. При решении поставленных задач использовались хорошо известные и надежные методы расчета – такие как модель сильной связи, приближение огибающей функции, нестационарная теория возмущений ("золотое правило Ферми") – широко и успешно применявшиеся прежде многими авторами в различных задачах, сходных с теми, которые рассматриваются в диссертации. Выполненные расчеты ширины оптической щели нанокристаллов кремния и сечения поглощения согласуются с экспериментом.

Вынесенные на защиту научные положения физически обоснованы. Они базируются на прозрачных и понятных физических принципах и моделях, имеют наглядную физическую интерпретацию. В свою очередь, в основе этих принципов и моделей лежит владение автора как аналитическими, так и численными методами анализа и расчета сложных систем, а также его умение решать различные задачи квантовой физики полупроводников.

Полученные А.В. Белолипецким результаты прошли хорошую апробацию. Они опубликованы в ведущих российских и зарубежных научных изданиях, входящих в перечень ВАК и основные международные базы научного

цитирования (WoS и Scopus). Всего по теме диссертации опубликовано семь статей. Кроме того, результаты регулярно представлялись на российских и международных конференциях и совещаниях.

В целом, работа производит благоприятное впечатление. Вместе с тем, в диссертации есть отдельные неточности, которые бросаются в глаза при знакомстве с ней.

Так, например, вызывает некоторое удивление тот факт, что в названии диссертации фигурируют (отдельно) германиевые нанокристаллы, в то время как непосредственно в работе они, фактически, не исследуются. Рассматриваются лишь кремний-германиевые кластеры при различном содержании в них германия, и германиевые нанокристаллы получаются из них предельным переходом при стремлении доли германия в кластере к стопроцентной. Независимого же рассмотрения нанокристаллов германия, наподобие того, которое было выполнено для кремниевых нанокристаллов, в диссертации нет.

В диссертации неоднократно (см., например, стр. 4 – новизна) высказывается гипотеза о превращении аморфной матрицы диоксида кремния в β -кристобалит в окрестности нанокристалла кремния. На основе этой гипотезы в дальнейшем выстраивается некая "идеология", в рамках которой появляется возможность задействовать состояния матрицы в электронных переходах и сопоставить расчеты сечений поглощения с экспериментальными данными. В связи с этим возникает вопрос: есть ли какие-то прямые подтверждения этой гипотезы – например, какие-либо данные рентгеновских измерений?

Не совсем понятен тезис на стр. 16 (аналогичное утверждение имеется также и во второй главе) об отсутствии деформаций нанокристалла кремния, по причине его нахождения в аморфной матрице, на основании чего, далее, виртуальный кристалл, моделирующий эту самую матрицу, берется с постоянной решетки объемного кремния. Как хорошо известно, решетка даже полностью изолированного нанокристалла кремния в вакууме, т.е. не входящего в контакт ни с каким окружением, будет испытывать деформацию сжатия по отношению к своему состоянию в объемном материале. Думаю, что аморфная матрица поменяет количественно степень деформации нанокристалла, но не уберет ее полностью.

Во второй главе кремний-германиевый кластер моделируется виртуальным кристаллом. Применимость модели обосновывается близостью рассчитанного в ней электронного спектра к спектру, полученному в цитируемой работе [28] усреднением по реализациям Si/Ge нанокластеров с различным пространственным распределением атомов кремния и германия, но с фиксированными их долями. Вместе с тем ничего не говорится о том – насколько велик может быть разброс значений энергии в нанокластерах с разным пространственным распределением атомов германия и кремния. Представляется, что полученные в модели виртуального кристалла значения оптической щели нужно бы сопоставить и с характерной величиной этого разброса.

В третьей главе для расчета электронных и дырочных уровней в нанокристаллах используется модель простых зон (как проводимости, так и валентной), в которых законы дисперсии носителей являются изотропными с эффективными массами плотности состояний. Исходя из этой модели, автор пытается строго оценить размер нанокристалла, при котором в валентной зоне и в зоне проводимости будет появляться уровень. Возникает вопрос – имеет ли смысл приводить какие-то строгие численные оценки, если они базируются на такой грубой модели, которая сама по себе изначально вносит, по-видимому, достаточно большую ошибку?

Сделанные по работе замечания, в основном, направлены на возможную дальнейшую количественную корректировку полученных результатов, но, при этом, не ставят под сомнение физическую сущность предложенных моделей и правильность качественного анализа изучаемых систем. Общая оценка научного уровня диссертации остается достаточно высокой. Автором была избрана актуальная тема диссертации, полученные результаты обладают практической ценностью и научной новизной. Работа представляет собой законченное научное исследование. Структура и содержание диссертации соответствуют целям и задачам исследования. Автореферат полностью отражает содержание диссертации. Считаю, что работа А.В. Белолипецкого «Моделирование электронных состояний в кремниевых, германиевых и германий-кремниевых нанокристаллах» в полной мере отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Белолипецкий Алексей Владимирович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников.

Зав. кафедрой теоретической физики
ННГУ им. Н.И. Лобачевского
доктор физико-математических наук

В.А. Бурдов

Подпись В.А. Бурдова заверяю:
Ученый секретарь
ННГУ им. Н.И. Лобачевского

Л.Ю. Черноморская