

## О Т З Ы В

официального оппонента

о диссертации А.В. Белолипецкого “Моделирование электронных состояний в кремниевых, германиевых и германий-кремниевых нанокристаллах”, представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – “Физика полупроводников”.

Физика полупроводников последних десятилетий фактически стала физикой полупроводниковых структур пониженной размерности. Исследования таких структур чрезвычайно интересны с научной точки зрения и перспективны для применений благодаря значительному прогрессу полупроводниковой технологии. Их малые размеры приводят к кардинальной перестройке энергетического спектра и к возникновению новых возможностей практического использования полупроводниковых материалов. Богатство энергетического спектра в низкоразмерных структурах, вызываемое размерным квантованием и возможностью «конструировать» комбинации слоев различного состава и толщин квантовых ям и барьеров, открывает новые пути для разработки различных оптоэлектронных устройств. Дополнительные возможности для управления характеристиками полупроводниковых наноструктур (и оптоэлектронных устройств на их основе) дает вариация размеров структурных элементов. Особый интерес исследователей вызывают так называемые квантовые точки - нанокристаллы с квантовым ограничением движения частиц во всех трех пространственных направлениях, т.е. фактически, нульмерные системы. Основной проблемой при получении и использовании квантовых точек в оптоэлектронике является их взаимодействие с материалом матрицы, в которой они находятся. Именно этим вопросам посвящена диссертационная работа А.В. Белолипецкого, в которой рассчитываются оптические и электронные свойства нанокристаллов (НК) кремния, германия и их сплавов при их взаимодействии с матрицей двуокиси кремния, а также нанокристаллов кремния в матрице аморфного гидрогенизированного кремния. Расчеты проведены с помощью компьютерного моделирования в рамках метода сильной связи. В настоящее время нанокристаллы кремния успешно используются в различных областях полупроводниковой оптоэлектроники. В силу сказанного, **актуальность** тематики диссертации не вызывает сомнений.

Диссертация состоит из введения, трёх глав и заключения. Список цитированной литературы включает 84 ссылки. Во **Введении** дана общая характеристика работы: обоснована ее актуальность, объявлены цели и задачи работы, изложены новизна и практическая значимость полученных результатов, сформулированы положения, выносимые на защиту.

В **первой главе** изложены результаты моделирования электронных состояний нанокристаллов кремния, внедрённых в матрицу аморфной двуокиси кремния. Дан краткий обзор метода сильной связи, обоснована возможность и условия применения этого метода для описания НК (параграфы 1.1 и 1.2). Предложен способ расчета, основанный на идее о том, что аморфная матрица, окружающая нанокристалл в ближней зоне, воспроизводит структуру нанокристалла. Рассчитаны энергии и волновые функции электронных состояний в этих НК (параграф 1.3). Показано, что взаимное энергетическое положение краёв запрещённых зон кремния и SiO<sub>2</sub> почти не меняет ширину запрещённой зоны НК, однако сильно влияет на туннелирование электронов из НК в матрицу. Вычислено сечение оптического поглощения и показано, что для НК диаметром 3 нм полученные результаты хорошо согласуются с известными экспериментальными данными.

**Вторая глава** посвящена моделированию электронных состояний НК сплавов кремний-германий в матрице аморфной двуокиси кремния. Показано, что метод сильной связи дает хорошее приближение в расчётах электронных состояний в НК SiGe, внедрённых в SiO<sub>2</sub>. Рассчитано сечение поглощения для прямых оптических переходов в НК разного

размера. Расчеты проведены, в основном, для НК малых размеров (2,5-3,5 нм). Установлено, что сечение поглощения сильно растёт с увеличением содержания германия в сплаве SiGe. Показано, что в НК с малой долей германия (в частности, в чисто кремниевых НК) вклад в поглощение дают, в основном, оптические переходы в матрице и на интерфейсе НК-матрица. В НК с большим содержанием Ge (а также в чисто германиевых НК) существенно также прямое оптическое поглощение в самих НК. Рассмотрены также цепочки НК и проанализированы механизмы транспорта в них, включающие как туннелирование между НК через состояния матрицы, так и прямое туннелирование между соседними НК в плотных цепочках.

В **третьей главе** проведено моделирование электронных состояний в кремниевых нанокристаллах в матрице аморфного гидрогенизированного кремния (a-Si:H). В расчетах учитывались основные особенности a-Si:H: наличие хвостов плотности состояний для электронов и дырок в щели подвижности и дефектные состояния в её центре. Найдены уровни энергии для электронов и дырок в НК как с локализованным носителем заряда одного знака, так и с локализованным экситоном. Вычислены сечения захвата электронов и дырок нанокристаллами. Предсказано существование канала безызлучательной рекомбинации носителей заряда, созданных освещением. Построена его модель, состоящая в захвате носителя в НК и последующего резонансного туннелирования в хвосты плотности состояний в матрице. Показано, что в НК с размерами < 3 нм этот механизм рекомбинации может быть доминирующим. В НК больших размеров доминирует излучательная рекомбинация внутри НК.

В **заключении** суммируются полученные в диссертационной работе научные результаты.

В целом, в диссертационной работе получен целый ряд **новых** результатов, интересных в **фундаментальном** отношении и перспективных для **практического** применения. **Достоверность** результатов основана на использовании апробированных методик расчетов, и подтверждена согласием с результатами экспериментов.

Некоторые замечания по работе.

1. Первое замечание – общее. В диссертации практически не приводятся детали компьютерного моделирования: сложности, возникающие при расчетах, и способы их преодоления автором. Мне кажется, что диссертация – это именно то место, где эти детали можно изложить во всей полноте.
2. Желательно было бы учесть возможную деформацию нанокристаллов. Утверждение "в аморфной матрице нет деформации" (с.16) желательно обосновать.
3. Для верификации вычисленных в диссертации коэффициентов поглощения желательно оценить роль переходов с участием фононов.
4. Спектральная зависимость сечения поглощения, приведенная на рис. 1.11, демонстрирует осциллирующий характер. Желательно было бы объяснить физическую причину этих осцилляций.
5. Желательно было бы выяснить влияние формы НК на электронные спектры и коэффициенты поглощения. В работе рассмотрены только сферические НК, хотя явно это отмечено только в гл. 3.
6. В гл. 3 (с. 68) при вычислении вероятности туннелирования носителя заряда из НК в состояние хвоста плотности состояний в матрице  $\alpha$ -Si это последнее рассматривалось в модели потенциала нулевого радиуса. Желательно было бы это приближение обосновать.
7. Некоторые замечания по оформлению диссертации. Необходимо отметить: известную лаконичность в описании расчетных методик; недостаточную зачастую расшифровку аббревиатур. Хотя в целом диссертация написана ясно и хорошим языком, встречаются оригинальные обороты и выражения. Например, "легкая масса направлена вдоль оси" (с. 8, 56), "метод берет свои начала от..." (с. 9), "диоксид кремния ...представляет из себя (sic) стеклообразное тело" (с. 14), "НК "с узкой матрицей" (имеется в виду ширина зоны)" (с. 21), "цепочка электронных состояний (повидимому, имеется в виду цепочка НК) (с.32), "

Важной особенностью SiGe является ...технология производства.." (с. 33), "вырождение слегка устраняется" (с. 43), " подвижность для носителя заряда начинает происходить по делокализованным состояниям" (с. 53), " волновая функция склонна к локализации" (с. 54)

Все эти замечания (за исключением 7) фактически являются пожеланиями к дальнейшему развитию работы и не снижают высокой оценки диссертационной работы в целом. Диссертация А.В. Белолипецкого представляет собой законченную фундаментальную научную работу в актуальном направлении физики полупроводников. Результаты работы опубликованы в ведущих научных журналах и известны по докладам на конференциях. Автореферат полно и правильно отражает содержание диссертации.

Диссертационная работа А.В. Белолипецкого полностью удовлетворяет всем требованиям ФТИ им. А.Ф. Иоффе, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Белолипецкий Алексей Владимирович, безусловно заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников`.

Официальный оппонент:

зав. лаб. электронных процессов в полупроводниковых материалах ИРЭ РАН,

доктор. физ.-мат. наук

(М.С. Каган)

Специальность: 01-04-10 Физика полупроводников

Ученое звание: старший научный сотрудник

тел.: +7(495)6293361, e-mail: kagan@cplire.ru

Наименование организации: ФГБУН Институт радиотехники и электроники им.

В.А.Котельникова Российской академии наук

Адрес: 125009 Москва, ГСП-9, Моховая ул., 11, корп. 7

Сайт: [www.cplire.ru](http://www.cplire.ru); тел.: +7 (495) 629 3574; факс: +7 (495) 629 3678; e-mail: ire@cplire.ru

Отзыв удостоверяю

Ученый секретарь Института радиотехники и электроники им. В.А.Котельникова РАН

кандидат физ.-мат. наук

(И.И. Чусов)

7 октября 2020 г.