

Отзыв официального оппонента о диссертационной работе
Авдеева Ивана Дмитриевича
«Эффекты междолинного взаимодействия
в наноструктурах из халькогенидов свинца»,
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 01.04.02 – теоретическая физика

Актуальность темы диссертации. Диссертация посвящена расчету электронной зонной структуры и спектров оптических переходов в наноструктурах из халькогенидов свинца.

Халькогениды свинца являются узкозонными полупроводниками, с шириной запрещенной зоны, лежащей в среднем и ближнем инфракрасном диапазоне. Важным свойством этих соединений является относительно малая эффективная масса носителей, что приводит к ярко выраженным эффектам размерного квантования в наноструктурах на их основе. Это приводит к возможности тонкой настройки ширины запрещенной зоны, и как следствие, рабочей длины волны оптоэлектронных устройств, таких как инфракрасные лазеры, сенсоры и солнечные элементы.

За последние десять лет прогресс в нанотехнологиях позволил создавать одиночные наноструктуры на основе халькогенидов свинца с контролируемым размером и формой, что открывает возможности для реализации источников и приемников одиночных фотонов в телекоммуникационном диапазоне частот. Для проектирования таких устройств необходимы количественные модели электронной зонной структуры и оптических свойств таких систем, разработке которых и посвящена диссертационная работа И.Д. Авдеева. Тем самым, **актуальность темы диссертации И.Д. Авдеева не вызывает сомнений.**

Анализ содержания диссертации, новизна и достоверность полученных результатов. В диссертационной работе И.Д. Авдеевым поставлен и решен ряд актуальных и новых теоретических задач, в частности рассчитаны величины междолинного смешивания и спинового расщепления в нанопроволоках из халькогенида свинца, а также рассчитан спектр магнетофотолюминесценции в квантовых точках PbS.

Диссертация И.Д. Авдеева состоит из введения, четырех глав и заключения. Во введении сформулированы цели и задачи диссертационной работы, приведены положения, выносимые на защиту, сформулирована актуальность и практическая значимость исследования.

В *первой*, методической главе, кратко изложены основные теоретические методы, изложенные в данной работе: метод сильной связи, метод конфигурационного взаимодействия для расчета экситонного спектра, а также изложены основы симметричного анализа.

Во второй, третьей и четвертой главах представлены новые и оригинальные научные результаты. Каждая глава начинается с обширного обзора литературы по тематике и обосновывает постановку решаемых в главе задач.

Вторая глава диссертации посвящена расчету электронных спектров нанопроволок PbSe с ориентацией вдоль осей [111] и [110]. Проведен анализ долинных расщеплений состояний в рамках приближенного **kp** метода и точного решения методом сильной связи. Построены локальные плотности состояний в прямом и обратном пространстве для нескольких основных состояний. Проведен расчет линейных по волновому вектору спиновых расщеплений. Расчеты проводились как для цилиндрических, так и для ограниченных нанопроволок. Показано, что величина долинного смешивания чувствительна

к форме огранки нанопроволоки. Наконец, проведен анализ устойчивости долинных расщеплений к возмущениям поверхности нанопроволоки.

Третья глава посвящена расчету электронных спектров квантовых точек PbS различной формы с учетом междолинного смешивания. Кроме того, рассчитана тонкая структура экситона в квантовых точках, проведено моделирование спектров поглощения и фотолюминесценции квантовых точек, показавшее хорошее согласие с экспериментом. Наконец, проведен расчет спектров магнетофотолюминесценции квантовых точек и получена оценка для g-факторов экситона.

В *четвертой* главе приведен подробный модели тонкой структуры экситона в квантовых точках PbS. Вывод основан на **kr** методе. Впервые получен эффективный гамильтониан, учитывающий размерное квантование, кулоновское взаимодействие и долинное расщепление.

В *заключении* подведен итог выполненных исследований и кратко сформулированы основные научные результаты, полученные в диссертации И.Д. Авдеева. Сказанное выше **подтверждает новизну результатов**, полученных в диссертационной работе.

Достоверность основных полученных результатов и выводов сомнений не вызывает, и обусловлена выбором адекватного теоретического формализма, сравнения (где это возможно) полученных результатов с экспериментальными данными и теоретическими результатами, полученными другими авторами при помощи альтернативных моделей. Достоверность результатов подтверждается также их широкой апробацией на многочисленных российских и международных конференциях.

Научная и практическая значимость диссертации И.Д. Авдеева состоит в том, что в ней даны количественные оценки влияния долинного смешивания на электронный спектр и оптические свойства наноструктур на основе халькогенидов свинца. Научная значимость состоит в том, что в применении к данным структурам развита комбинация взаимодополняющих теоретических методов (**kr**, метод эффективной массы, метод конфигурационного взаимодействия, метод сильной связи), позволяющих проводить количественно точный детальный анализ этих наноструктур. Практическая значимость состоит в том, что дан ряд конкретных предсказаний о влиянии размера, огранки и поверхностных дефектов на оптические свойства наноструктур, что важно для создания оптоэлектронных приборов на основе халькогенидов свинца.

К диссертации И.Д. Авдеева, однако, есть ряд **замечаний**:

1. Возможно стоило бы подробнее изложить в каком случае достаточно использовать приближение (1.8-1.9) об отсутствие переходов внутри одного атома. Конечно, зачастую учет таких переходов дает лишь малые поправки к электронному спектру, однако в диссертации исследуются относительно тонкие эффекты, и не до конца понятно, не приведет ли учет внутриатомных переходов к их существенной модификации.
2. На мой взгляд, в главе 2 стоило бы подробнее обсудить осциллирующую зависимость спиновых расщеплений от диаметра нанопроволоки. Например, численный расчет на рисунке 2.5(a) предсказывает, что спиновые расщепления при определенных значениях диаметра становятся почти равными нулю (не до конца понятно, является ли небольшие отступления от нуля следствием численной ошибки или они действительно очень малы, но не ноль). Возможно, можно бы было дать какое-то качественное объяснение обнулению спиновых расщеплений при определенных значениях диаметра.
3. Аналогичный вопрос возникает и в главе 3, где обсуждается зависимость g-фактора от эффективного диаметра квантовых точек. Возможно, стоило бы попробовать привести качественное объяснение такой дискретной зависимости.

В значительной мере эти замечания, однако, носят формальный характер и **не умаляют общей высокой оценки работы И.Д. Авдеева.**

Диссертация Ивана Дмитриевича Авдеева является законченной научной работой, выполненной на высоком научном уровне. В работе сформулирована и решена проблема влияния междолинного смешивания на электронные и оптические свойства халькогенидов свинца. Материалы диссертации опубликованы в авторитетных физических журналах (Nano Letters, Small и Physical Review и др.), докладывались автором на тематических конференциях. Автореферат правильно и достаточно полно отражает содержание диссертации.

В заключение, я считаю, что по актуальности тематики, новизне положений и их обоснованности и достоверности диссертационная работа И.Д. Авдеева «Эффекты междолинного взаимодействия в наноструктурах из халькогенидов свинца» полностью отвечает критериям, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук в соответствии с п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г. (ред. от 01.10.2018), а ее автор, Авдеев Иван Дмитриевич, безусловно заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика.

д.ф.-м.н. главный научный сотрудник
физического факультета
ФГАОУВО «Национальный исследовательский
университет ИТМО»
197101, г.Санкт-Петербург,
Кронверкский пр., д.49, лит.А
e-mail: i.iorsh@metalab.ifmo.ru
тел: +7 905 219 5432

Иорш И.В.

Подпись *Иорш И.В.*
удостоверяю
Менеджер ОПС
Ершов Д.А.