

## Отзыв

на автореферат диссертации Обухова Сергея Владимировича  
«Ab initio теория электрон-фононных процессов в полупроводниковых кристаллах»  
представленную к защите на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – Физика полупроводников

В диссертационной работе С.В. Обухова проведено теоретическое исследование явлений, связанных с рассеянием электронов на коротковолновых фононах в полупроводниковых соединениях. Понимание сущности этих процессов чрезвычайно важно для интерпретации явлений переноса, физики быстропротекающих процессов, релаксации высоковозбужденных состояний в полупроводниках. Для достижения поставленной цели в работе развита методика квантовомеханического расчета из первых принципов вероятностей электрон-фононного рассеяния на основе метода функционала электронной плотности и теории возмущений функционала электронной плотности. Проведены беспараметрические расчеты вероятностей рассеяния электронов на фононах с произвольной длиной волны в девяти бинарных полупроводниках  $A^{III}B^V$ , а также в кремнии и германии. Полученные значения констант электрон-фононной связи применены затем для исследования вклада электрон-фононных процессов в термоэлектрические явления в кремнии. Также в работе построена теория диссоциации прямого экситона в германии, вызванная процессами электрон-фононного рассеяния. Рассчитанные вероятности рассеяния в условиях всестороннего сжатия использованы для количественной интерпретации зависимости ширины спектральной линии экситона от внешнего давления в широком диапазоне.

Постановка задачи в работе актуальна, применены современные методы исследования. В работе получены новые и интересные для приложений результаты. Наиболее важным из них, на наш взгляд является разработанная автором методика расчета для так называемых запрещенных электрон-фононных переходов в кремнии и их применение к расчету термоэлектрических характеристик. Обоснованность и достоверность защищаемых положений не вызывает сомнений.

Имеются замечания к оформлению автореферата:

- Для подтверждения хорошего согласия расчетов с экспериментом на рис 3. следовало бы разместить экспериментальные данные, которые в литературе известны. Было бы правильно ввести на рисунках обозначения главных направлений в зоне Бриллюэна.
- В матричном элементе в формулах 1 и 2 автореферата не исправлена явная опечатка.
- Представляется излишним введение малоинформативного рисунка 1. С другой стороны, следовало бы ввести рисунки зонной структуры кремния и германия с указанием фононов, осуществляющих междолинные переходы. Это сделало бы изложение теории более наглядным.
- В таблице 5 непонятны обозначения  $K^0$  (м.б. это просто  $K$  ?) и  $\varepsilon V/A$  (м.б. это просто  $\varepsilon V/A$  ?).

Указанные недостатки не оказывают влияния на нашу оценку работы. По моему мнению, диссертационная работа актуальна, выполнена на высоком научном уровне, результаты полностью отражены в рейтинговых научных публикациях. Она соответствует

требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 01.04.10 «Физика полупроводников»

Главный научный сотрудник Института  
химии твердого тела Уральского отделения  
РАН, д. ф.-м. н.  
620099, Екатеринбург, Первомайская 91,  
тел. 8-343-362-33-87,  
zhukov@ihim.uran.ru

Жуков Владлен Петрович

Подпись д. ф.-м. н. Жукова В.П. заверяю  
Ученый секретарь Института  
химии твердого тела Уральского отделения  
РАН, д. х. н.



Денисова Т.А.