

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Обухова Сергея Владимировича
«*Ab initio* теория электрон-фононных процессов в полупроводниковых кристаллах»,
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 01.04.10 – Физика полупроводников

Изучение динамических характеристик кристаллической решетки является актуальной задачей современного теоретического материаловедения, поскольку знание особенностей фононной подсистемы позволяет предсказывать многие важные физические свойства материалов, среди которых эффект теплового расширения, теплопроводность. Кроме того, появляется возможность описывать свойства, связанные с электрон-фононным взаимодействием, например, сверхпроводимость, удельное сопротивление металлов и т.д. Известно, что для некоторых элементарных полупроводников и соединений $A^{III}B^V$ параметры внутридолинного электрон-фононного взаимодействия достаточно хорошо изучены как экспериментальными, так и теоретическими методами в том числе первопринципными методами. Однако междолинное рассеяние электронов на коротковолновых фононах, которое определяет многие оптические и кинетические свойства, изучалось только в рамках наиболее простых феноменологических моделей. В этой связи актуальность темы диссертации С.В. Обухова не вызывает сомнений.

В диссертационной работе С.В. Обухов были решены несколько важных задач физики полупроводников. Было проведено изучение процесса рассеяния электронов на фононах с произвольной длиной волны, а также проведена оценка вклада электрон-фононного взаимодействия в термоэлектрические характеристики. Кроме того, установлена связь ширины экситонной линии с характеристиками электрон-фононного рассеяния в таких технологически важных материалах, как элементарные полупроводники четвертой группы и бинарные полупроводниковые соединения третьей и пятой групп. Для решения данных задач автором были рассчитаны вероятности рассеяния электронов на коротковолновых фононах в соединениях $A^{III}B^V$, а также разработана и апробирована методика расчета вероятности рассеяния электронов на фононах с произвольной длиной волны в элементарных полупроводниках Si и Ge. Необходимо отметить систематический подход к рассматриваемой проблеме. Во второй главе диссертации представлены результаты расчетов параметров решетки, электронных и колебательных спектров, констант электрон-фононного рассеяния для девяти соединений $A^{III}B^V$. В третьей главе автор рассмотрел рассеяние электронов на фононах произвольной длины волны в кремнии, причем рассматривались даже запрещенные в первом порядке теории возмущений переходы. Наиболее интересными представляются

четвертая и пятая главы, в которых представлены результаты изучения электрон-фононного взаимодействия в германии под давлением. Автору удалось построить теорию распада прямого экситона в германии вследствие рассеяния на междолинных фононах. Автору удалось оценить вклады от различных каналов рассеяния и идентифицировать фоны, отвечающие за эти процессы. Отмечается, что рассчитанные при низких и комнатных температурах времена междолинного рассеяния хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными.

В качестве замечания следует отметить имеющиеся в автореферате опечатки. Например, на странице 9 в таблице 5 написано эВV, вместо эВ; на странице 13 в последнем абзаце при обсуждении времени междолинного рассеяния дается ссылка на рисунок 9(a), хотя на рисунке 9(a) приведены данные по ширине спектральной линии экситона. Тем не менее, отмеченные выше замечания не затрагивают основные положения работы и не снижают общей положительной оценки работы.

Результаты, полученные С.В. Обуховым, представляются достоверными, поскольку в диссертации использовались апробированные и хорошо зарекомендовавшие себя методы DFT и псевдопотенциала, а полученные результаты находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными и теоретическими расчетами других авторов. Результаты опубликованы как в зарубежных, так и российских журналах, а также докладывались на международных и российских конференциях.

По актуальности проблемы, объему и научному уровню выполненных исследований, представленная диссертационная работа «*Ab initio* теория электрон-фононных процессов в полупроводниковых кристаллах» удовлетворяет требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Сергей Владимирович Обухов заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – Физика полупроводников.

Кулькова Светлана Евгеньевна

доктор физико-математических наук, профессор,
главный научный сотрудник лаборатории физики нелинейных сред
Института физики прочности и материаловедения
Сибирского отделения Российской академии наук
634055, г. Томск, пр. Академический 2/4
(3822) 49-18-81, root@ispms.tomsk.ru, www.ispms.ru

20.11.2015

