

ОТЗЫВ

официального оппонента

на диссертацию Обухова Сергея Владимировича «*Ab initio* теория электрон-фононных процессов в полупроводниковых кристаллах», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – Физика полупроводников.

Актуальность темы диссертации

Предметом исследования диссертационной работы является первопринципный расчет в рамках метода функционала плотности с использованием пакета Espresso 3.2 междолинного рассеяния электронов на коротковолновых фононах в полупроводниковых кристаллах. В то время как электрон-фононные процессы с участием длинноволновых фононов к настоящему времени изучены достаточно хорошо, рассеяние электронов на коротковолновых фононах изучено гораздо в меньшей степени. Для бинарных кристаллов $A^{III}B^V$ теоретические расчеты междолинных деформационных потенциалов до настоящего времени ограничивались либо феноменологическими теориями, либо рассмотрением некоторых отдельных каналов рассеяния в рамках первопринципного метода замороженных фононов. В тоже время знание деформационных потенциалов рассеяния на коротковолновых фононах с произвольной длиной волны является необходимым элементом для физической интерпретации процессов релаксации энергий и импульса высоковозбужденных электронов в полупроводнике. Такое физическое понимание процессов релаксации может внести определенный вклад в решение задачи поиска и прогнозирования материалов, обладающих необходимыми параметрами для работы при высоких уровнях возбуждения. Это дает основание утверждать, что научная проблема, сформулированная в

диссертации, является актуальной.

Структура диссертации

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, пяти приложений и списка литературы из 139 наименований. Общий объем диссертации составляет 134 страниц, работа содержит 52 рисунка и 15 таблиц.

Во введении содержится анализ современного состояния проблемы, постановка задачи, обоснование ее актуальности, а также новизны и практической значимости полученных результатов, защищаемые положения. Для достижения поставленной в диссертации цели, связанной с развитием новых представлений о физике электрон-фононных процессов в полупроводниках, сформулированы четыре задачи, которые были успешно решены диссертантом с использованием методов функционала электронной плотности.

В первой главе приведен обзор методов исследования, содержатся необходимые сведения из теории функционала электронной плотности, аналитические соотношения и рабочие формулы, используемые в работе.

В последующих главах содержатся оригинальные результаты, полученные в работе.

Вторая глава содержит самосогласованные расчеты междолинных деформационных потенциалов для важнейших электрон-фононных каналов рассеяния в девяти полупроводниковых кристаллах группы $A^{III}B^V$.

В третьей главе приведена методика и впервые выполнены квантовомеханические расчеты вероятностей рассеяния на f- и g- междолинных фононах в кристалле кремния.

В четвертой главе проведен теоретический анализ зависимости энергетической структуры кристалла германия от гидростатического давления. Впервые рассчитана зависимость параметров электрон-фононной связи от

давления.

В пятой главе представлены результаты применения рассчитанных параметров электрон-фононого взаимодействия при исследовании термоэлектрических характеристик кристалла кремния, а также процесса безизлучательного распада прямого экситона в германии в условиях гидростатического давления.

В заключении перечислены наиболее важные результаты работы.

Ряд обширных графиков и таблиц с целью удобства восприятия основного текста вынесены *в Приложения*.

Степень обоснованности научных положений и выводов, сформулированных в диссертации

Автор использует в своей работе хорошо себя зарекомендовавшие в теории твердого тела методы функционала плотности и псевдопотенциала, а также теорию возмущений функционала электронной плотности. Разработанные в диссертации теоретические модели логически верны и обоснованы. Полученные основные результаты исследования детально сравнивались с имеющимися экспериментами и работами других авторов и хорошо согласуются как с теоретическими выводами, так и с экспериментальными данными, известными из литературы. Достоверность проведенных расчетов и обоснованность выводов из них не вызывает сомнений.

Научная новизна и теоретическая значимость диссертационной работы

В диссертации получены новые научные результаты. Наиболее значимыми из них являются следующие:

1. Показано, что метод функционала плотности и метод DFPT позволяют адекватно описать процессы рассеяния электронов на коротковолновых фононах в кристаллах Si, Ge и бинарных соединениях типа $A^{III}B^V$.

2. Установлено, что вычисление первопринципных деформационных потенциалов для междолинного рассеяния электронов весьма важно для адекватного построения теории процессов переноса заряда и тепла, поскольку уменьшает число феноменологических параметров при моделировании.

3. Установлено, что время жизни и ширина спектральной линии прямого экситона в Ge определяются вероятностью его диссоциации за счет процессов рассеяния электронов на коротковолновых фононах.

4. Показано, что зависимость ширины спектральной линии прямого экситона от всестороннего давления в Ge обусловлена зависимостью каналов электрон-фононного рассеяния от изменения с давлением относительного положения L , Δ и X минимумов в электронном спектре кристалла.

Практическая значимость диссертационной работы

Константы взаимодействия электронов с фононами, вычисленные из первых принципов, являются параметрами, которые необходимы для целей моделирования оптических и транспортных свойств исследуемых в работе кристаллов четвертой группы и бинарных полупроводниковых соединений. В части исследования термоэлектрического эффекта в кремнии результаты находятся в русле проблемы развития энергосберегающих технологий, входящей в перечень важнейших направлений развития науки в РФ.

Критические замечания по диссертационной работе.

1. В приложениях вынесен обширный материал, который обсуждается только в главе 2 и только в самых общих словах. В самих же приложениях никакого обсуждения не предлагается. На наш взгляд это является упущением и если данные приводятся, их следует обсуждать.

2. Содержание обзорного раздела «Длинноволновые фононы» на стр 36-40 выглядит инородным телом, нигде далее в исследовании необходимость в

таковых не возникает и никакие расчеты с ними не производятся, поскольку исследуются только коротковолновые фононы.

3. Работа оформлена неаккуратно. Кроме грамматических ошибок, в тексте диссертации встречаются места, где эта небрежность создает для читателя трудности в понимании целей и результатов расчета. В частности, на стр. 69 написано, что теоретическое значение параметра решетки равно 5.62Å . На этой же стр. написано, что экспериментальное значение параметра равно 5.62Å и поэтому дальнейшие расчеты проводились при отрицательном сдвиге давления. На стр. 52 написано, что на рис 2.4 приведен спектр фононов GaP, в то время как там на самом рисунке значится AlP.

Указанные недостатки не влияют на общую положительную оценку диссертационной работы.

Заключение оппонента по диссертационной работе

Диссертация является законченным научно-исследовательским трудом, выполненным автором самостоятельно на высоком научном уровне. В работе приведены научные результаты, позволяющие квалифицировать их как новые и ценные. Полученные автором результаты достоверны, выводы и заключения обоснованы.

Работа базируется на достаточном числе исходных данных, примеров и расчетов. Она написана доходчиво, по каждой главе и работе в целом сделаны четкие выводы. Содержание диссертационной работы соответствует паспорту специальности 01.04.10 – «Физика полупроводников».

По результатам работы написано 15 статей. Среди них 6 работ опубликованных в журналах, включенных в Перечень российских рецензируемых научных журналов, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук, из них 5 статей, включенных в библиографическую

базу данных цитирования Web of Science. Материалы диссертационной работы обсуждались на международной и нескольких всероссийских конференциях.

Автореферат соответствует основному содержанию диссертации. Диссертационная работа отвечает критериям Положения о порядке присуждения ученых степеней, а ее автор Обухов Сергей Владимирович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – «Физика полупроводников».

Официальный оппонент:

Главный научный сотрудник лаборатории кристаллофизики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук (ИФ СО РАН), доктор физико-математических наук (01.04.07 – Физика конденсированного состояния), профессор

Зиненко Виктор Иванович

Адрес: 660036, г. Красноярск, Академгородок 50, строение 38

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики им Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук (ИФ СО РАН), e-mail: dir@iph.krasn.ru, www.kirensky.ru, телефон: +7(391)2432635

Подпись Зиненко В.И. заверяю

Ученый секретарь ИФ СО РАН,
к.ф.-м. наук

Дата: 18.11.2015г.



С.И. Попков