

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»

Теоретическая работа Обухова Сергея Владимировича посвящена исследованию процессов рассеяния электронов на фонах с произвольной длиной волны в полупроводниках четвертой группы и соединениях $A^{III}B^V$, используемых при разработке фотоприемников на квантовых точках, а также солнечных элементов. Считается, что процессы рассеяния электронов на коротковолновых фонах в полупроводниках еще недостаточно изучены. Именно эти процессы рассеяния определяют многие оптические и транспортные свойства полупроводниковых структур, на основе которых уже создаются и могут быть созданы новые приборы. В соответствии с этим представленная работа актуальна.

Вычисления электронной структуры выполнены в рамках приближения функционала электронной плотности. Теория возмущений в базисе плоских волн использована для описания возбуждений и фононных частот. Из всех известных форм псевдопотенциала выбрана та, которая дает наилучшее согласие с экспериментом для кристаллов $A^{III}B^V$ по значению постоянной решетки, по электронной структуре и фононному спектру. Интегрирование по зоне Бриллюэна выполнялось с использованием десяти специальных точек. Количество плоских волн в разложении волновых функций определялось фактором обрезания кинетической энергии, равным $45 R_y$. Зонная структура и фононные спектры соединений $A^{III}B^V$ при конкретных значениях постоянной решетки вычислялись с использованием пакета программ Espresso 3.2.

Вычислены вероятности рассеяния электронов на колебаниях решетки, деформационные потенциалы, константы электрон-фононной связи, подвижность электронов, коэффициент Зеебека, времена релаксации электронов при рассеянии фонами и другие характеристики исследуемых полупроводников. Изучено влияние температуры и легирования. Анализ результатов расчетов позволил утверждать о том, что междолинное рассеяние в простых и бинарных полупроводниках удовлетворительно описывается методом теории возмущений функционала электронной плотности.

Непротиворечивость представленных результатов вычислений, их согласие с экспериментальными и теоретическими данными, имеющимися в литературных источниках, подтверждает достоверность результатов работы.

В целом работа выполнена на высоком научном уровне, в достаточной мере апробирована. Основные результаты отражены в публикациях, приведенных в автореферате.

Считаем, что диссертационная работа Обухова Сергея Владимировича удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – «Физика полупроводников».

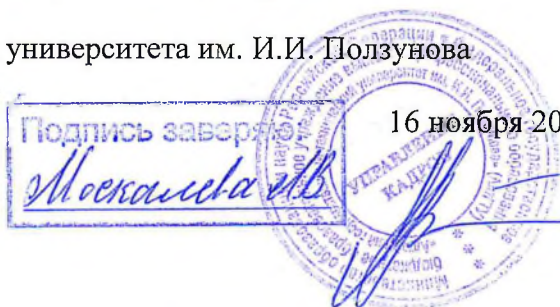
Доктор физико-математических наук,
профессор, зав. кафедрой «Физика»

Старостенков Михаил Дмитриевич
Email: genphys@mail.ru

Доктор физико-математических наук,
профессор кафедры «Физика»

Попов Валерий Андреевич
Email: pva@mail.ru

Алтайский государственный технический университета им. И.И. Ползунова
Адрес: 656038, г. Барнаул, пр. Ленина, 46.
Email: altgtu@list.ru



16 ноября 2015 года