

ОТЗЫВ

официального оппонента

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

Актуальность темы диссертации

Диссертация Обухова С.В. посвящена теоретическому исследованию процессов электрон-фоонного взаимодействия в кристаллах Si, Ge и в бинарных кристаллах $A^{III}B^V$. Выбранная тема и объекты исследования представляют большой интерес для фундаментальной физики полупроводников и разработчиков электронной техники, поскольку рассеяние электронов на колебаниях решетки в той или иной мере проявляется в большинстве физических свойств материалов и приводит к целому ряду интересных эффектов, которые уже используются в приборных структурах. Несмотря на очевидную значимость решаемой диссертантом задачи, в научной литературе ей уделено недостаточное внимание. Прежде всего, это относится к процессам междолинных электронных переходов на коротковолновых фононах, интенсивность которых описывается деформационными потенциалами. Знание таких потенциалов для наиболее эффективных каналов рассеяния необходимо для правильной интерпретации экспериментальных спектров горячей люминесценции, непрямозонного оптического поглощения, комбинационного рассеяния света и т.д. В связи с этим, следует признать несомненную актуальность проведенного автором исследования.

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. Основные результаты исследования представлены в виде четырех защищаемых положений и пяти выводов.

Введение содержит обзор литературы, постановку задачи исследования, обоснование новизны и практической значимости работы, а также положения, выносимые на защиту.

Первая глава содержит обзор теоретических методов исследования, используемых в работе.

Во второй главе представлены оригинальные результаты первопринципных расчетов вероятностей междолинного рассеяния электронов на колебаниях решетки в кристаллах A^3B^5 .

В третьей главе приведены результаты квантовомеханических расчетов деформационных потенциалов для междолинных f- и g-переходов в кристалле кремния.

В четвертой главе представлена теория электрон-фононного рассеяния в Ge в условиях гидростатического давления.

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

В заключении перечислены важнейшие результаты, полученные в работе.

Приложения содержат дополнительные материалы в виде графических иллюстраций и таблиц

Научная новизна и диссертационной работы

Наиболее значимыми из новых научных результатов являются следующие:

1. Автором впервые вычислены на основе полностью самосогласованных квантовомеханических расчетов вероятности рассеяния электронов на коротковолновых фононах в кристаллах Si, Ge и девяти соединениях $A^III B^V$.

2. Полученные параметры электрон-фононной связи с успехом применены для расчета термоэлектрических характеристик в кремнии.

3. Показано, что экситон-фононное взаимодействие и безызлучательный распад экситона в Ge обусловлены рассеянием электронов на коротковолновых фононах.

4. Рассчитана зависимость ширины спектральной линии прямого экситона от всестороннего давления в Ge на основе рассчитанных параметров междолинного рассеяния на фононах.

Теоретическая и практическая значимость диссертационной работы

Теоретический расчет деформационных потенциалов представляет собой сложную задачу, для решения, которой необходимо построение теории в каждом отдельном случае. На этом пути, однако, возникают достаточно серьезные проблемы как чисто вычислительного характера, так и на этапе анализа полученных результатов, поскольку деформационные потенциалы зависят от свойств двух взаимодействующих систем – электронной и фононной. Это накладывает повышенные требования к точности описания волновых функций электронов и векторов поляризации фононов, удовлетворить которым могут лишь фундаментальные методы расчета. С другой стороны, наглядная и детальная “расшифровка” механизмов рассеяния для кристаллов сама по себе представляет довольно сложную и объемную задачу, требующую глубокого понимания электронных и колебательных состояний. В связи с этим, полученные диссертантом количественные результаты и их качественная интерпретация имеют большое значение в объяснении и понимании целого ряда процессов протекающих в полупроводнике, что и определяет их теоретическую и практическую значимость.

Степень обоснованности научных положений и достоверность результатов и выводов, сформулированных в диссертации

Защищаемые положения, выводы и рекомендации диссертации являются обоснованными и вытекают из полученных в работе теоретических данных. Достоверность полученных в работе результатов обеспечивается корректной постановкой задач, использованием современных теоретических методов исследования характеристик твердых тел, метода эмпирического псевдопотенциала и теории функционала плотности, а также детальным анализом полученных результатов в сопоставлении с расчетными данными других исследователей и имеющимися экспериментальными данными. Полученные результаты не противоречат результатам других авторов и известным экспериментальным данным. Результаты исследования прошли необходимую апробацию на конференциях и

семинарах. Все основные результаты работы опубликованы в 15 статьях в научных журналах, из них 6 включенных в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание учёной степени кандидата наук (из них 3 статьи в зарубежных научных изданиях, индексируемых в Web of Science и 2 статьи в российских научных журналах, переводные версии которых индексируются в Web of Science),

Отмечая содержательность, принципиальную новизну и оригинальность результатов, считаю целесообразным обсуждение некоторых из них в критическом контексте:

Критические замечания по диссертационной работе.

1. В Главах 3 и 4 убедительно доказано, что значения деформационных потенциалов для виртуальных переходов недостаточно для адекватного описания электрон-фоонных процессов в кремнии и германии. Но в предыдущей Главе 2, приведен массовый расчет значений именно виртуального деформационного потенциала в кристаллах A^3B^5 со ссылкой на метод Конуэлл. В работе не содержится убедительных аргументов, почему этим следует ограничиться в бинарных соединениях.
2. Параграф 5.1.1 посвященный теории и решению уравнения Больцмана, поскольку он не содержит оригинальных результатов, следовало бы на наш взгляд перенести в обзорную главу диссертации.
3. Раздел 1.3.1 «Рассеяние электронов на длинноволновых колебаниях» посвящен обзору теории рассеяния только на длинноволновых фонах. Вся диссертация посвящена исследованию рассеяния на коротковолновых фонах, и при этом имеется вполне достаточно материала для обсуждения. Поэтому наличие довольно обширного раздела 1.3.1, нигде далее в тексте не использующегося, вызывает определенное недоумение.

Заключение оппонента

Резюмируя критическую часть представленного анализа работы, считаю необходимым сделать следующее заключение. Указанные замечания не затрагивают

существа защищаемых положений и выводов и не влияют на общую положительную оценку работы. Диссертационная работа является завершенным научным исследованием, автореферат полно отражает содержание, идеи и выводы диссертации. Защищаемые положения и выводы с достаточной полнотой освещены в опубликованных работах.

Диссертация Обухова Сергея Владимировича «*Ab initio* теория электрон-фононных процессов в полупроводниковых кристаллах» является хорошим научно-квалификационным исследованием и соответствует требованиям предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, а ее автор достоин присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 - физика полупроводников

Официальный оппонент:

кандидат физико-математических наук (01.04.10 – Физика полупроводников), научный сотрудник комплексного научно-исследовательского отдела региональных проблем федерального государственного бюджетного учреждения науки Омский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук

Сачков Виктор Анатольевич

Дата 10.11.2015г.

644024, г. Омск, пр. Карла Маркса, 15,

тел. : (3812) 37-17-36 , факс: (3812) 37-17-62

E-mail: adm@oscsbras.ru, <http://www.oscsbras.ru/>

Подпись Сачкова В.А. заверяю
ВРИО председателя ОНЦ СО РАН
кандидат химических наук



Рашида Хафизовна Карымова