

СВЕДЕНИЯ О РЕЗУЛЬТАТАХ ПУБЛИЧНОЙ ЗАЩИТЫ ДИССЕРТАЦИИ

Диссертационный совет Д 212.267.07, созданный на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», извещает о результатах состоявшейся 17 декабря 2015 года публичной защиты диссертации Обухова Сергея Владимировича «Ab initio теория электрон-фононных процессов в полупроводниковых кристаллах» по специальности 01.04.10 – Физика полупроводников на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

Время начала заседания: 16.45

Время окончания заседания: 18.45

На заседании диссертационного совета присутствовали 20 из 24 утверждённых членов диссертационного совета, из них 7 докторов наук по специальности 01.04.10 – Физика полупроводников:

1. Багров В.Г., председатель диссертационного совета	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
2. Ивонин И.В., заместитель председателя диссертационного совета	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
3. Киреева И.В., ученый секретарь	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
4. Бордовицын В.А.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
5. Брудный В.Н.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
6. Войцеховский А.В.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
7. Гермогенов В.П.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
8. Давыдов В.Н.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
9. Дударев Е.Ф.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
10. Караваев Г.Ф.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
11. Коротаев А.Д.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
12. Ляхович С.Л.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
13. Мельникова Н.В.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
14. Потекаев А.И.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
15. Старенченко В.А.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
16. Тюменцев А.Н.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
17. Тютюрев В.Г.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
18. Чумляков Ю.И.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
19. Шаповалов А.В.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
20. Шарапов А.А.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02

Заседание провёл председатель диссертационного совета, доктор физико-математических наук, профессор Багров Владислав Гаврилович.

По результатам защиты диссертации тайным голосованием (результаты голосования: за присуждение ученой степени – 20, против – нет, недействительных бюллетеней – нет) диссертационный совет принял решение присудить С.В. Обухову ученую степень кандидата физико-математических наук.

Заключение диссертационного совета Д 212.267.07
на базе федерального государственного автономного образовательного
учреждения высшего образования
«Национальный исследовательский Томский государственный университет»
Министерства образования и науки Российской Федерации
на соискание ученой степени кандидата наук
аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 17.12.2015 г., № 45

О присуждении **Обухову Сергею Владимировичу**, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация **«*Ab initio* теория электрон-фононных процессов в полупроводниковых кристаллах»** по специальности **01.04.10** – Физика полупроводников, принята к защите 08.10.2015 г., протокол № 37, диссертационным советом Д 212.267.07 на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации (634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, приказ о создании диссертационного совета № 798-745/68 от 13.04.2007 г.).

Соискатель **Обухов Сергей Владимирович**, 1984 года рождения.

В 2007 г. соискатель окончил государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Томский государственный педагогический университет» (по специальности «Физика» с дополнительной специальностью «Математика»). В 2013 г. соискатель окончил федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Томский государственный педагогический университет» (по направлению «Педагогическое образование»).

В 2010 г. соискатель очно окончил аспирантуру государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Томский государственный педагогический университет».

Работает в должности ассистента кафедры экспериментальной физики в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» Министерства образования и науки Российской Федерации; по совместительству – в должности инженера научно-образовательного центра «Наноэлектроника» в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации.

Диссертация выполнена на кафедре общей физики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Томский государственный педагогический университет» Министерства образования и науки Российской Федерации, в научно-образовательном центре «Наноэлектроника» федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации и на кафедре экспериментальной физики физико-технического института федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» Министерства образования и науки Российской Федерации.

Научные руководители:

доктор физико-математических наук, **Тютюрев Валерий Григорьевич**, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Томский государственный педагогический университет», кафедра общей физики, заведующий кафедрой

доктор физико-математических наук, **Брудный Валентин Натанович**, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», научно-образовательный центр «Наноэлектроника», директор.

Официальные оппоненты:

Зиненко Виктор Иванович, доктор физико-математических наук, профессор, федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук, лаборатория кристаллофизики, главный научный сотрудник

Сачков Виктор Анатольевич, кандидат физико-математических наук, федеральное государственное бюджетное учреждение науки Омский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук, комплексный научно-исследовательский отдел региональных проблем, научный сотрудник

дали положительные отзывы о диссертации.

Ведущая организация – федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «**Кемеровский государственный университет**», г. Кемерово, в своем положительном заключении, подписанном **Поплавным Анатолием Степановичем** (доктор физико-математических наук, профессор, кафедра теоретической физики, заведующий кафедрой), указала, что процессы рассеяния носителей заряда на фонах с произвольной длиной волны играют важную роль в функционировании современных полупроводниковых приборов, но недостаточно хорошо изучены. Полученные в диссертационной работе результаты путем расчетов из первых принципов константы электрон-фононной связи для простых полупроводников Si и Ge и соединений $A^{III}B^V$ являются новыми научными данными. К наиболее значимым результатам относятся: построение из первых принципов метода расчета вероятностей рассеяния электронов на фонах с произвольной длиной волны в кристаллах кремния, в том числе для переходов, запрещенных в первом порядке теории возмущений; построение теории и расчет зависимости времени релаксации электронов для рассеяния на междолинных фонах в германии под давлением. Показано, что разработанный метод, основанный на первопринципных расчетах, позволяет наиболее полно учесть вклад рассеяния электронов на фонах в подвижность электронов, теплопроводность и коэффициент Зеебека в кремнии. Построена теория распада прямого экситона в германии за счет рассеяния электронов

на междолинных фононах. Полученные результаты и разработанные методы могут найти применение в исследованиях по физике твердого тела, физике конденсированного состояния, физике полупроводников, проводимых в различных научных и учебных заведениях, а также для создания и применения приборов полупроводниковой электроники, в частности, в работах по энергосберегающим технологиям, связанным с применением термоэлектрического эффекта.

Соискатель имеет 19 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации – 15 работ, опубликованных в рецензируемых научных изданиях – 6 (из них 3 статьи в зарубежных журналах, включенных в Web of Science, и 2 статьи в российских журналах, переводные версии которых включены в Web of Science), в научных журналах – 2, в сборниках материалов международных и всероссийских научных конференций – 7, научные статьи, депонированные в ВИНТИ РАН – 2. Общий объем публикаций – 5,34 п.л., авторский вклад – 1,67 п.л.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации, опубликованные 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:

1. Никитина Л. Н. Самосогласованный расчет деформационных потенциалов для междолинных переходов с участием фононов в кристаллах $A^{III}B^V$ / Л. Н. Никитина, С. В. Обухов, В. Г. Тютюрев // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2008. – Т. 51, № 12. – С. 99–99b. – 0.56 / 0.15 п.л.

2. Никитина Л. Н. Ab initio расчет деформационных потенциалов для междолинных переходов с участием фононов в кристаллах $A^{III}B^V$ со структурой сфалерита / Л. Н. Никитина, С. В. Обухов, В. Г. Тютюрев // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2009. – Т. 52, № 7. – С. 78–83. – 0.6 / 0.2 п.л.

в переводной версии журнала:

Nikitina L. N. Ab initio calculations of the deformation potentials for intervalley phonon-assisted transitions in $A^{III}B^V$ crystals with sphalerite structure / L. N. Nikitina, S. V. Obukhov, V. G. Tyuterev // Russian Physics Journal. – 2009. – Vol. 52, Is. 7. – P. 742–748. – 0.6 / 0.2 pp. – DOI: 10.1007/s11182-009-9289-1

3. **Обухов С. В.** Abinitio расчет деформационных потенциалов для междолинных фононов в кремнии / С. В. Обухов, В. Г. Тютюрев // Физика твердого тела. – 2009. – Т. 51, вып. 6. – С. 1051–1054. – 0.48 / 0.24 п.л.

в переводной версии журнала:

Obukhov S. V. Ab Initio Calculation of the Deformation Potentials for Intervalley Phonons in Silicon / S. V. Obukhov, V. G. Tyuterev // Physics of Solid State. – 2009. – Vol. 51, Is. 6. – P. 1110–1113. – 0.48 / 0.24 p.p. – DOI: 10.1134/S1063783409060031

4. Wang Z. Thermoelectric transport properties of silicon: Toward an ab initio approach / Z. Wang, V. Tyuterev, S. **Obukhov** et al. // Physical Review B. – 2011. – Vol. 83. – P. 205208. – 0.6 / 0.06 p.p. – DOI: 10.1103/PhysRevB.83.205208

5. Tyuterev V. G. Ab initio calculation of electron-phonon scattering time in germanium / V. G. Tyuterev, S. V. **Obukhov**, N. Vast, J. Sjakste // Physical Review B. – 2011. – Vol. 84. – P. 035201-1–035201-6. – 0.65 / 0.15 p.p. – DOI: 10.1103/PhysRevB.84.035201

6. Jani H. Ab initio study of the effects of pressure and strain on electron-phonon coupling in IV and III-V semiconductors / H. Jani, S. **Obukhov**, V. Tyuterev et al. // Physica Status Solidi (B) Basic Research. – 2013. – Vol. 250(4). – P. 716–720. – 0.47 / 0.03 p.p. – DOI: 10.1002/pssb.201200526

На диссертацию и автореферат поступили 7 положительных отзывов. Отзывы представили: 1. **М.Д. Старостенков**, д-р физ.-мат. наук, проф., заведующий кафедрой «Физика» Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова, г. Барнаул, *без замечаний*. 2. **М.Д. Старостенков**, д-р физ.-мат. наук, проф., заведующий кафедрой «Физика» Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова, г. Барнаул, и **В.А. Попов**, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры «Физика» Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова, г. Барнаул, *без замечаний*. 3. **А.П. Протогенов**, д-р физ.-мат. наук, проф., ведущий научный сотрудник Федерального исследовательского центра Института прикладной физики РАН, г. Нижний Новгород, *без замечаний*. 4. **С. Е. Кулькова**, д-р физ.-мат. наук, проф., главный научный сотрудник лаборатории физики нелинейных сред Института

физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, *с замечанием*: в автореферате имеются опечатки. 5. **А.В. Двуреченский**, чл.-корр. РАН, д-р физ.-мат. наук, проф., заместитель директора Института физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, г. Новосибирск, *с замечанием*: представляется интересным результат уменьшения времени релаксации электрона в гамма-долине при увеличении гидростатического давления в германии до времён порядка 0.2 пикосекунды, тем более что полученное время (фактически время электрон-фононного взаимодействия) меньше двух периодов колебаний оптического фонона в германии, но автор не приводит объяснение данного эффекта. 6. **В.П. Жуков**, д-р физ.-мат. наук, главный научный сотрудник Института химии твердого тела УрО РАН, г. Екатеринбург, *с замечаниями*: для подтверждения хорошего согласия расчетов с экспериментом на рис 3 следовало 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 рис. 1; следовало бы ввести рисунки зонной структуры кремния и германия с указанием фононов, осуществляющих междолинные переходы; в табл. 5 непонятны обозначения. 7. **В.В. Соболев**, чл.-корр. АН Республики Молдова, д-р физ.-мат. наук, проф., заведующий отделом спектроскопии Института экспериментального естествознания Удмуртского государственного университета, г. Ижевск, *с замечаниями*: неясно, что такое ширина спектральной линии: обычно рассматривают полуширину; непонятно, какой параметр, кроме энергии фонона, влияет на формирование полуширины полосы экситона; *и с вопросом*: гидростатическое давление изменяется при 300 К, когда экситонной полосы нет: а какова температура на рис. 9?

В отзывах на автореферат отмечается, что изучение динамических характеристик кристаллической решетки является актуальной задачей физики полупроводников, поскольку знание особенностей фононной подсистемы позволяет предсказывать многие важные физические свойства полупроводниковых материалов. Знание времён обмена энергией между электронной и фононной подсистемами важно для оценки кинетики фазовых переходов при сверхкоротких

(субпикосекундных и фемтосекундных) импульсных лазерных воздействиях. Наиболее интересными представляются четвертая и пятая главы, в которых представлены результаты исследования зависимости полуширины спектральной линии прямого экситона от всестороннего давления в германии. Подчеркнуто, что в работе получены новые и интересные для приложений результаты, которые будут интересны как теоретикам, так и экспериментаторам.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что **В.И. Зиненко** является известным специалистом в области теоретических исследований физических свойств кристаллов, в том числе полупроводниковых соединений; **В.А. Сачков** является квалифицированным специалистом в области теоретических расчетов фоновых спектров и исследования динамических свойств полупроводниковых кристаллов и структур; на кафедре теоретической физики **Кемеровского государственного университета** работают квалифицированные специалисты, известные своими достижениями в области теоретических расчетов физических свойств полупроводниковых соединений.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработана квантово-механическая теория расчетов вероятностей рассеяния электронов на коротковолновых фонах в зоне проводимости простых и бинарных полупроводников;

предложен метод расчета междолинных деформационных потенциалов, в том числе для запрещенных f - и g -переходов в кремнии;

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

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказано, что процессы рассеяния электронов на коротковолновых фонах в кристаллах Si, Ge и бинарных соединениях типа $A^{III}B^V$ должны исследоваться на основе метода функционала электронной плотности;

применительно к проблематике диссертации эффективно использованы метод функционала плотности и теория возмущений функционала электронной плотности;

изложены результаты расчета вероятностей электрон-фононного рассеяния в кристаллах кремния, германия и девяти кристаллов бинарных полупроводников $A^{III}B^V$ со структурой сфалерита;

изучена динамика процесса распада экситона в кристалле в зависимости от приложенного всестороннего давления.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

разработана теория и проведен количественный анализ вклада электрон-фононного рассеяния в процессы релаксации энергии и импульса в полупроводниках;

определены структурные и электронные факторы, ответственные за процесс диссоциации экситона в германии в условиях внешнего давления;

представлены результаты, которые могут быть использованы для расчета процессов переноса заряда и энергии горячими электронами в полупроводниках, в том числе после воздействия на них высокоэнергетическими излучениями.

Рекомендации об использовании результатов диссертационного исследования.

Полученные результаты могут быть использованы в научных и образовательных учреждениях, в которых ведутся исследования по сходной тематике: Институте физики им Л.В. Киренского СО РАН (Красноярск), Институте физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН (Новосибирск), Омском научном центре СО РАН, Кемеровском государственном университете, Институте химии твердого тела УрО РАН (Екатеринбург), Институте прикладной физики РАН (Нижний Новгород), Алтайском государственном техническом университете им. И.И. Ползунова (Барнаул), Институте физики прочности и материаловедения СО РАН (Томск), Национальном исследовательском Томском политехническом университете, Национальном исследовательском Томском государственном университете.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

идея базируется на квантово-механической природе электрон-фононного взаимодействия и известных методиках расчета структурных и энергетических характеристик в твердых телах;

использовано сопоставление авторских результатов с полученными ранее результатами по данной тематике;

установлено качественное и количественное согласие авторских результатов с результатами, представленными в независимых источниках.

Научная новизна работы заключается в том, что для полупроводниковых кристаллов группы $A^{III}B^V$ впервые проведен анализ рассеяния электронов зоны проводимости на коротковолновых фононах на основе первопринципного расчета методом функционала электронной плотности. Впервые рассчитаны значения деформационных потенциалов для актуальных переходов в зоне проводимости девяти кристаллов группы $A^{III}B^V$. Разработан основанный на первых принципах метод расчета вероятностей рассеяния электронов на фононах с произвольной длиной волны в кристаллах кремния, в том числе для переходов, запрещенных в первом порядке теории возмущений. Построена теория рассеяния на междолинных фононах в германии и рассчитана зависимость времени релаксации электронов в этом материале в условиях всестороннего сжатия. Проведены вычисления термоэлектрических характеристик полупроводников с выходом за пределы приближения времени релаксации. Вычислен из первых принципов вклад рассеяния электронов на фононах в подвижность электронов и коэффициент Зеебека в кремнии. Построена теория распада прямого экситона в германии, учитывающая рассеяние на междолинных фононах. Рассчитанная по этой теории зависимость полуширины спектральной линии экситона в этом материале от внешнего всестороннего давления хорошо согласуется с известными из литературных источников экспериментальными данными.

Личный вклад соискателя состоит в выполнении, обработке и анализе всех расчетов, проведенных в работе. Постановка задач кандидатской диссертации, построение теоретических моделей, обсуждение результатов, формулировка

научных положений и выводов проводились совместно с научными руководителями. При активном участии автора подготовлены основные публикации по теме диссертации.

Диссертация соответствует п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задачи о процессах взаимодействия фононов с произвольной длиной волны с электронами зоны проводимости, имеющей значение для развития физики полупроводников.

На заседании 17.12.2015 г. диссертационный совет принял решение присудить **Обухову С.В.** ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 20 человек, из них 7 докторов наук по специальности 01.04.10 – Физика полупроводников, участвовавших в заседании, из 24 человек, входящих в состав совета, проголосовал: за – 20, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель

диссертационного совета



Багров Владислав Гаврилович

Ученый секретарь

диссертационного совета

Киреева Ирина Васильевна

17.12.2015 г.