

Отзыв

официального оппонента Рожанского Игоря Владимировича на диссертацию Дегтярева Владимира Евгеньевича «Численное моделирование энергетических и спиновых характеристик квантово-размерных гетероструктур различной геометрии на основе полупроводников $A^{III}B^V$ », представленную в диссертационный совет Д 212.166.01 при Нижегородском государственном университете им. Н.И. Лобачевского на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников

Диссертационная работа В.Е. Дегтярева посвящена теоретическому исследованию особенностей энергетического спектра, распределения зарядовой плотности, электрофизических и оптических свойств квантово-размерных гетероструктур на основе полупроводников $A^{III}B^V$ с использованием методов численного моделирования. Особое внимание уделено моделированию вольт-фарадных характеристик гетероструктур, содержащих квантовые ямы и дельта слои, особенностям энергетического спектра и распределения плотности электронного газа в нанопроволоках с различной формой поперечного сечения и расчетам параметров спин-орбитального расщепления спектра электронов в квантовых ямах .

Исследование электронных, оптических и спиновых явлений в полупроводниковых гетероструктурах пониженной размерности в настоящее время является одним из основных направлений развития современной физики конденсированного состояния. Гетероструктуры на основе полупроводников $A^{III}B^V$ являются неотъемлемой частью современной наноэлектроники, телекоммуникационной и вычислительной техники. Особенностью современного этапа развития наноэлектронных приборов является усложнение их конструкции, при этом оптимизация дизайна гетероструктур является важнейшей задачей, которая должна сопровождаться теоретическими исследованиями электронных и оптических свойств. Особую важность при этом приобретают методы численного моделирования, учитывающие квантовомеханические эффекты, определяющие свойства систем пониженной размерности. Диссертация посвящена именно таким исследованиям, тем самым **актуальность** темы диссертационной работы не вызывает сомнений. Выполненные в диссертации исследования и полученные

результаты являются важными как для фундаментальной науки, так и для возможных приборных применений.

Диссертация состоит из Введения, четырёх Глав, Заключения, списка работ автора по теме диссертационного исследования и списка литературы.

Во Введении обоснованы актуальность и новизна исследований, сформулированы цели и задачи, положения, выносимые на защиту, описаны научная и практическая значимость работы, апробация работы и личный вклад автора.

В первой главе приводится обзор существующих и используемых в работе методов исследования низкоразмерных структур. Рассматриваются вопросы диагностики данных структур, применения приборов на их основе и методов их получения. Перечислены теоретические подходы, с помощью которых проводится анализ электронных свойств низкоразмерных структур, модели решения уравнения Шрёдингера для электронной системы кристалла, такие как приближение эффективной массы и k.p-метод. Рассмотрены численные методы, используемые для моделирования энергетического спектра носителей в квантово-размерных структурах, указаны особенности различных методов получения приближённого решения соответствующих дифференциальных уравнений.

Вторая глава диссертации посвящена численным расчетам в рамках метода эффективной массы энергетического спектра и моделированию вольт-фарадных характеристик для гетероструктур различного дизайна, содержащих квантовые ямы и дельта-легированные слои. Метод расчёта основан на численном решении стационарного уравнения Шрёдингера, согласованного с уравнением Пуассона с использованием методов релаксационных коэффициентов и ньютоновской линеаризации для улучшения сходимости решения. Особое внимание уделяется влиянию дельта-слоя на вольт-фарадные характеристики и эффективность управления концентрацией носителей в квантовой яме с помощью затвора.

Третья глава диссертации посвящена анализу энергетического спектра, распределения зарядовой плотности и электрического потенциала в одномерных гетероструктурах – квантовых проволоках и нанотрубках. Представлен алгоритм численного решения системы уравнений Шрёдингера и Пуассона с применением конечно-разностной пространственной дискретизации. Проведен тщательный анализ

особенностей указанных свойств для различной геометрии сечения нанопроволоки с учетом поверхностных состояний на границе. Приведены результаты моделирования энергетического спектра нанопроволок и нанотрубок в магнитном поле, приложенном вдоль оси структуры.

Четвертая глава диссертации посвящена расчетам электронного спектра и спинового расщепления в квантовых ямах на основе GaAs/InGaAs и InGaSb/GaSb с учётом спин-орбитального взаимодействия (COB). Для моделирования COB используется 8-зонная модель Кейна с конечно-разностной дискретизацией гамильтониана в реальном пространстве. Из анализа величины спинового расщепления в квантовых ямах для каждой из подзон размерного квантования получены значения параметров COB Рашба и Дрессельхауза. Проанализированы условия формирования состояния спинового хеликса, отвечающего равенству параметров COB Рашба и Дрессельхауза.

Полученные в диссертации результаты расчетов электронных и спиновых свойств низкоразмерных структур **обоснованы**. Их **достоверность** обусловлена применением современных хорошо зарекомендовавших себя методов расчета, тщательным анализом полученных данных, сопоставлением с аналитическими результатами в предельных случаях и согласием с близкими по тематике расчетами других авторов. В целом, диссертация хорошо написана и оформлена, основные результаты четко сформулированы.

Полученные результаты являются **новыми, научно значимыми** и вносят вклад в развитие физики полупроводниковых гетероструктур, наноэлектроники и спинтроники.

По диссертации имеются следующие замечания:

1. В разделе 2.4 обсуждается зависимость матричных элементов оператора координаты от параметров гетероструктуры. В тексте диссертации, однако, не обсуждается какой наблюдаемой физической величине соответствуют эти расчеты. Если речь идёт о скорости оптических переходов, то в неё кроме указанного матричного элемента входит и разность энергетических уровней, которая тоже зависит от параметров структуры.

2. В разделе 2.6.2 исследовано влияние толщины легирующего слоя на вольт-фарадную характеристику (ВФХ). Остаётся неясным, можно ли, руководствуясь полученными в диссертации результатами определить толщину дельта слоя из экспериментальных ВФХ и с какой точностью.
3. В параграфе 3.7 приводятся осцилляции проводимости от магнитного поля, приложенного по оси нанотрубки с периодом, приблизительно соответствующим кванту магнитного потока, но зависящим от геометрических параметров нанотрубки. При этом не обсуждается механизм этих осцилляций, остается неясным в какой степени полученные результаты объясняют осцилляции проводимости, наблюдаемые в эксперименте.
4. В разделе 3.8 исследуется изменение электронной плотности в структуре типа полевого транзистора. При этом обнаружено два эффекта – модуляция средней концентрации носителей напряжением на затворе и изменение пространственного распределения носителей. Последний эффект является особенно интересным, однако, неясно, имеет ли он какое-либо значение с точки зрения применений структуры в качестве полевого транзистора.
5. В главе 4 было бы уместно сравнить рассчитанные параметры спин-орбитального взаимодействия (СОВ) и условия реализации спинового хеликса с экспериментальными данными. В ряде работ (см. напр. Walser et.al, Nat. Phys 8, 757 (2012)) сообщаются экспериментально установленные параметры СОВ для гетероструктур на основе GaAs. Расчет параметров СОВ для структур, исследованных в этих или других экспериментах представляется важным применением разработанного в диссертации метода.

Отмеченные замечания не носят принципиального характера и не ставят под сомнение значимость полученных в диссертации результатов.

В целом, диссертационная работа В.Е. Дегтярева выполнена на высоком научном уровне и характеризуется ясностью изложения. Методы, используемые для численных расчетов обстоятельно изложены, корректность получаемых результатов тщательно верифицированы сравнением с аналитическими результатами. В диссертации получен целый ряд новых и интересных результатов. Работа вносит вклад в развитие физики полупроводников. Результаты, составившие основу

диссертации многократно докладывались на российских и международных конференциях и опубликованы в авторитетных реферируемых научных журналах: Физика и техника полупроводников (ФТП), Scientific Reports,

Автореферат и опубликованные статьи правильно и достаточно полно отражают содержание диссертации.

Считаю, что диссертационная работа В.Е. Дегтярева «Численное моделирование энергетических и спиновых характеристик квантово-размерных гетероструктур различной геометрии на основе полупроводников $A^{III}B^V$ » полностью соответствует критериям "Положения о присуждении ученых степеней" для ученой степени кандидата наук, утвержденного постановлением Правительства от 24.09.2013 г. № 842, а Дегтярев Владимир Евгеньевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников.

1 марта 2019

Официальный оппонент

Рожанский Игорь Владимирович

доктор физико-математических наук,

старший научный сотрудник

Федерального государственного бюджетного учреждения науки

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,

Адрес: ул. Политехническая, д. 26, Санкт-Петербург, 194021

e-mail: rozhansky@gmail.com

тел.: (812)2927155

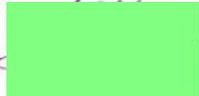
 И.В. Рожанский

Подпись Рожанского И.В. удостоверяю

Ученый секретарь ФТИ им. А.Ф. Иоффе,

д.ф.-м.н., профессор



 А.П. Шергин