

Відзив



офіційного опонента на дисертаційну роботу
Карпина Дмитра Степановича
“Вплив гетеромежі та домішок на стани та оптичний спектр поглинання квантових точок”,

подану на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла

Актуальність теми дисертаційної роботи. Сучасні технології квантових напівпровідникових квантових точок сформованих всередині скляної або напівпровідникової матриці дозволяють одержувати високоякісні наносистеми CdS/SiO_2 $CdSe/SiO_2$ $CdTe/SiO_2$, $InAs/GaAs$ з несуттєвою дисперсією у розмірах. Завдяки надзвичайно розгалуженій імплантованій поверхні поділу середовищ у таких структурах виникає багата фізика поверхневих явищ. Розглянуті в дисертації системи, як правило, формують неглибокі поверхневі потенційні ями з локальними станами у інфрачервоній та терагерцовій області частот. Цей напрямок фізики твердого тіла досі ще містить багато нез'ясованих моментів. Тому результати теоретичних досліджень впливу якості та геометрії гетерограниць на одночастинкові стани носіїв заряду представляються актуальними, вони можуть бути використані для проектування та розроблення високошвидкісних терагерцових перемикачів, надшвидкодіючих нанотранзисторів, оптично-реєструючих систем запису інформації та приладів високочастотної наноелектроніки.

За своєю структурою дисертаційна робота Карпина Д.С. складається із вступу, літературного огляду, п'ятьох оригінальних розділів з результатами виконаних розрахунків, висновків до кожного розділу та загальних висновків і переліку використаних літературних джерел із 81 найменувань. Загальний обсяг дисертації складає 112 сторінок з літературними джерелами та додатком, робота містить 23 рисунка та дві таблиці.

У вступі, згідно існуючих вимог, обґрунтовується актуальність теми дисертації, формулюються мета і завдання досліджень, наводяться відомості щодо наукової новизни і практичного значення отриманих результатів, а також особистого внеску здобувача, апробації та публікацій за результатами проведених досліджень.

У першому розділі на основі використаної літератури систематизовані та проаналізовані дані щодо впливу якості та геометрії гетеромежі, форми та розмірів КТ, наявності мілких домішок донорного та акцепторного типу на одночастинкові стани носіїв струму.

Зроблено висновок, що незважаючи на велике прикладне значення, ряд важливих питань теорії поглинання світла, що стосуються міжрівневого поглинання світла, зумовленого переходами за участю поверхневих станів різної природи, в тому числі, пов'язаними з поверхневою поляризаційною пасткою і поверхневими деформаціями залишаються нез'ясованими.

У другому розділі на основі гамільтоніана моделі квантової точки з двома акцепторними домішками розглянуто міжрівневе акцепторне поглинання електромагнітних хвиль квантовими точками $CdSe$. Для цієї системи одержано енергетичний спектр дірки у квантовій точці та проведено розрахунки поглинання електромагнітних хвиль квантовими точками різних розмірів з двома іонами акцепторних домішок залежно від відстані між іонами у наближенні чотиризонної сферичної моделі Балдареші-Ліпарі.

У третьому розділі проведено оцінки впливу поверхневої поляризаційної пастки на властивості квантової точки з домішкою. Розглянуто модель квантової точки з домішкою та поверхневої поляризаційної пастки. Проведено розрахунок енергетичного спектру

електрона у квантовій точці з донорною домішкою та знайдено енергетичний спектр електрона у квантовій точці з донорною домішкою та з поляризаційною пасткою на гетеро межі. Розраховано поглинання електромагнітних хвиль квантовою точкою з донорною домішкою і поляризаційною пасткою на гетеро межі квантова точка-матриця.

У четвертому розділі розглянуто вплив мілких домішкових станів та екситон-домішкових комплексів на міжзонне поглинання світла системою квантових точок. Наведено приклади моделі квантової точки з декількома типами мілких домішок різної природи. Обрано вид варіаційної функції основного стану, що для розв'язання рівняння Шредінгера методом Рітца. Визначено енергетичні спектри екситон-домішкових комплексів у квантових точках та розрахована енергія екситона та екситон-домішкових комплексів. Розглянуто поглинання світла екситон-домішковими комплексами декількох видів. Розраховано сумарний спектральний коефіцієнт поглинання світла у квантових точках CdS/SiO_2 малих розмірів, зумовлене екситонами та екситон-домішковими комплексами.

У п'ятому розділі розглянуто поверхневі стани квантових точок у моделі поверхневих станів згенерованих поляризаційною пасткою. Знайдена енергія поверхневих станів та розподіл густини ймовірності електрона в околі гетерограниці $CdSe/SiO_2$ та $CdTe/SiO_2$. Проведено розрахунки таммівських рівнів електрона у напружених квантових точках $CdSe/SiO_2$, $CdTe/SiO_2$ та $InAs/GaAs$.

Кожний з п'яти розділів дисертації завершується формулюванням висновків. **У Загальних висновках** підсумовано основні результати роботи.

У розділі Список використаних джерел наведений перелік літературних джерел. В цілому, обсяг у 81 посилань адекватно відображує ефекти взаємодії носіїв заряду поблизу границі напівпровідникової квантової точки з діелектричної матриці, формування спектру станів та оптичні явища яким присвячено дисертаційну роботу; за часом появи публікацій це від початку розробки основних методів у 70-х роках 20-го сторіччя до 2020 року.

Основні результати дисертаційної роботи.

Серед великої кількості отриманих результатів Дисертанта хотілося б відмітити (i) Знайдено, що поляризаційний потенціал напівпровідникової квантової точки формує своєрідний перехідний шар поблизу її границі, де діелектрична проникність змінюється від значення матеріалу точки до матеріалу матриці. З перехідним прошарком пов'язана потенціальна яма - поляризаційна пастка, у якій виникають поляризаційні поверхневі локальні стани. Визначено енергію цих станів та коефіцієнт поглинання світла, що зумовлений переходами між цими станами. (ii) Встановлено залежності енергії екситон-домішкових комплексів від розміру наноб'єкту. Показано, що обчислений коефіцієнт поглинання світла відповідає експериментальним кривим. (iii) Визначено вплив деформації квантової точки, внаслідок неузгодження параметрів її ґратки і матриці, на поверхневі рівні Тамма.

Ступінь обґрунтованості, достовірності та новизни наукових положень, висновків, рекомендацій. Достовірності розрахункових результатів роботи забезпечується застосуванням широко відомих і апробованих методів розрахунку електронних станів у потенціалах сферичної симетрії з урахуванням спин-орбітальної взаємодії та варіаційного метода Рітца.

Представлена робота заповнює важливу але недостатньо висвітлену в літературі тему міжрівневого поглинання світла у квантових точках, що зумовлене переходами за участю станів поверхневої поляризаційної пастки і поверхневого деформаційного потенціалу і у цьому її актуальність та наукова новизна.

Практичне значення одержаних результатів може зіграти свою роль при виборі оптимальної технології створення наноструктур з поверхневими поляризаційними пастками та локальними деформаційними потенціальними ямами на межі розділу середовищ для побудови нових оптичних приладів з розширеним спектральним діапазоном в інфрачервону область, а також для створення ефективних детекторів мікрохвильового випромінювання та для методу електронної спектроскопії енергетичних рівнів у системах

низької розмірності. Також отримані результати можна використовувати в спецкурсах фізики твердого тіла, фізики поверхні та матеріалознавства в процесі підготовки спеціалістів і магістрів.

Дисертантом Карпиним Д.С. проведені якісні наукові дослідження та отримані результати, які задовольняють критеріям наукової новизни, достовірності та практичної значущості. Отримані дані непогано корелюють з результатами експериментів, виконаних іншими дослідниками.

Все ж-таки деякі аспекти роботи викликають зауваження і потребують спеціального обговорення в критичній частині відзиву.

1. Структура дисертації

1.1. На мій погляд, робота виглядала б набагато краще, якщо розділи 1-5 супроводжувались більш детальною постановкою задачі з наведеними геометричними та фізичними даними досліджуваних структур.

1.2. Можливо, блок-структуру кодів слід було привести у графічному вигляді, або винести у якості ще одного Додатку.

2. Постановка фізичної задачі та методи розрахунку.

2.1. Суттєвою особливістю прийнятої моделі є наявність у потенціалі так званої поляризаційної пастки. Чи існують умови формування поляризаційної анти-пастки? Основою для такого запитання є той факт, що заряд у середовищі з більшою проникністю буде відштовхуватись від границі розділу з середовищем меншої проникності, оскільки зображення формується того ж знаку.

2.2. Який зв'язок існує (якщо) між поляризаційною анти-пасткою і деформаційним потенціалом?

2.3. У Вступі стверджується, що *«наявність гетеромежі приводить до появи додаткового механізму розсіювання носіїв заряду на нерівностях поверхні»*. Далі ця тема в роботі не обговорюється.

2.4. Сульфід кадмію, матеріал квантової точки, існує у двох кристалічних модифікаціях: кубічній та гексагональній. В роботі розглядається кубічна, але ні мотивації ні обговорення які відмінності у оптичних проявах можуть спостерігатися в реальних квантових точках в залежності від модифікації не наводиться. Крім того, в малих об'ємах порядку 10^4 кубічних ангстремів можуть формуватися також інші типи структур.

2.5. Проблемою є, на мій погляд, застосування об'ємних значень діелектричної проникності для об'єктів ангстремних розмірів, оскільки, власне, діелектричний відгук середовища формується починається з достатньо великої кількості атомів і має суттєво спадати для малих об'єктів.

3. Зауваження до фізичних результатів.

3.1. Чим відрізняються результати Автора наведені у рис. 2.1 на сторінці 44 для енергії дірки у квантовій CdSe точці від отриманих для цієї ж системи у цитованій роботі [66], рис. 2?

3.2. Яка фізична природа більш ефективного поглинання світла CdSe квантової точки на переході з М-моментом $3/2$, ніж з моментом $1/2$ м (рис. 2.3)?

3.3. До результатів Розділу 3. Формула 3.1 представляє повний гамільтоніан, а не *«потенціальну енергію взаємодії електрона з поляризаційними зарядами»*, як стверджується нижче. Сумарний потенціал електрона Π у сферичній КТ (CdS) радіусом a , що поміщена у матрицю SiO₂ фактично не визначений у формулах 3.1 – 3.5, хоча у рис. 3.2 наводиться графік для нього, причому у абсолютних величинах координати при невизначеному значенні константи a .

4. Термінологія та позначення

4.1. На мою думку, в українській фізичній літературі конкурують терміни «гетеромежа» і «гетерограниця», що відповідають англійському «hetero-boundary». Дисертант є прихильником першого, але більш поширеним є, все ж таки, другий.

4.2. Заряд q не пояснено, формула (1.19).

5. Ілюстрації та таблиці

Вище вже наводилося зауваження до графічного відображення постановки задачі яке фактично відсутнє.

5.1. Рис. 2.3: На графіку сумарного коефіцієнта поглинання проявилася ще одна крива для $\alpha_{1,1/2;2,1/2}$.

5.2. Рисунок 3.3 потребує пояснень своїх частин (а) та (б).

5.3. Рисунок 3.4, залежність густини ймовірності на фоні потенціалу, мабуть від координати r , а не радіуса квантової точки a ?

6. У тексті дисертації зустрічаються дефекти оформлення і неточності:

6.1. На сторінці 31, формула (1.12) містить повтори та пропуски. Заряд q незручно вплетаний серед матриць густини та дипольного моменту (формули 1.24, 1.25).

6.2. На сторінці 40, коментар перед формулою 2.8 та деякі інші, як, наприклад, *гетеросистема з великим розривом зон (наприклад, CdSe/SiO₂)*.

6.3. На сторінці 40, коментар перед формулою 2.8 та деякі інші, як, наприклад, *гетеросистема з великим розривом зон (наприклад, CdSe/SiO₂)*.

Висловлені вище зауваження не знецінюють результатів дисертаційної роботи. Дисертація Карпина Дмитра Степановича є самостійним і завершеним науковим дослідженням, в якому вперше встановлено, що донорна домішка та поверхнева поляризаційна пастка індукують виникнення поверхневих станів квантової точки, особливо для малих розмірів квантової точки між 10 та 30 ангстрем. Основні результати роботи повною мірою відображені в 7 публікаціях у фахових виданнях та пройшли апробацію на декількох міжнародних наукових конференціях. Автореферат дисертації повно та адекватно відображає структуру, зміст та основні висновки роботи.

Вважаю, що за об'ємом, новизною, науковим рівнем та практичною вагомістю отриманих результатів дисертаційна робота " Вплив гетеромежі та домішок на стани та оптичний спектр поглинання квантових точок " відповідає вимогам МОН України, а її автор, Карпин Дмитро Степанович, заслуговує на присудження наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла.

Провідний науковий співробітник
Інституту фізики напівпровідників
ім. В.Є. Лашкарьова
НАН України, доктор фізико-математичних наук,
професор



Є.Я. Глушко

