



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе СПбГУ

С. В. Микушев

2021 года

ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертационную работу

Авдеева Ивана Дмитриевича

«Эффекты междолинного смешивания в наноструктурах из халькогенидов свинца»,
представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 01.04.02 — «Теоретическая физика».

Диссертационная работа И.Д. Авдеева посвящена теоретическому исследованию эффектов междолинного смешивания в нанопроволоках и квантовых точках из селенида и сульфида свинца. Благодаря уникальным оптическим и электронным свойствам эти материалы являются перспективными для создания нового поколения устройств фотовольтаики и оптоэлектроники, в том числе для квантовых источников света. В последнее время активно развиваются методы коллоидного синтеза и спектроскопии наноструктур из этих материалов. Для создания прототипов приборов и их дальнейшего использования в промышленности необходимо детальное понимание тонкой структуры электронных, дырочных и экситонных состояний в наноструктурах из халькогенидов свинца. Для этого необходимо аккуратно учитывать эффекты междолинного смешивания, возникающие за счет междолинного рассеяния на границе наноструктур. Это требует не только использования современных атомистических методов для моделирования наноструктур, но и теоретико-группового и общего аналитического подхода для интерпретации полученных результатов. Поэтому результаты теоретического моделирования, полученные в диссертации И.Д. Авдеева, являются актуальными и значимыми в современной теоретической физике.

Диссертация состоит из Введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Она содержит 142 страницы текста, включая 33 рисунка. Список цитируемой литературы содержит 137 наименований. Во Введении сформулирована цель диссертационной работы: теоретическое исследование эффектов, связанных с междолинным рассеянием электронов и дырок в нанопроволоках и квантовых точках из халькогенидов свинца, а также разработаны общие аналитические и численные методы, применимые для исследования наносистем из многодолинных полупроводниковых материалов. Обоснована актуальность и научная новизна работы, сформулированы основные положения, кратко изложена структура

диссертации.

Первая глава диссертации посвящена методу сильной связи и анализу с использованием теории представлений групп. Метод сильной связи является основным методом, используемым в диссертационной работе для расчета одно- и двухчастичных состояний в наноструктурах из халькогенидов свинца. В этой главе изложен основной формализм метода сильной связи, способ учета внешних полей, схема расчета преобразования Фурье рассчитанных волновых функций, а также описаны особенности зонной структуры халькогенидов свинца. Во второй части главы описана процедура расчета кулоновских матричных элементов. Третья часть посвящена симметричному анализу состояний в рамках метода сильной связи. В ней приведены оригинальные алгоритмы вычисления матрицы поворота волновых функций и симметризации состояний, также здесь приведены выражения для расчета поворотной симметрии двухчастичных состояний в виде определителей Слэтера.

Вторая глава диссертации И.Д. Авдеева посвящена нанопроволокам из селенида свинца. После краткого обзора литературы изложена обобщенная модель нанопроволок в рамках метода эффективной массы, проанализирована симметрия состояний и структура долинных расщеплений. В третьем разделе приведены результаты расчета электронной структуры состояний в цилиндрических нанопроволоках с осью, направленной вдоль [111]. В последнем разделе главы приведены результаты расчета электронной структуры ограниченных нанопроволок с осью, направленной вдоль [110]. Исследована зависимость долинных расщеплений от формы сечения нанопроволок, проанализировано влияние поверхностных дефектов, пассивации и релаксации поверхности на долинные расщепления. В этой главе И.Д. Авдеевым было показано, что в нанопроволоках из халькогенидов свинца при отсутствии центра инверсии могут наблюдаться гигантские линейные по волновому вектору спиновые расщепления. Также установлено, что основным фактором, влияющим на величину долинных расщеплений в нанопроволоках, является форма их поверхности.

Третья глава диссертации посвящена квантовым точкам из сульфида свинца. В начале главы приведен краткий обзор литературы. Во втором разделе описана микроскопическая структура моделируемых квантовых точек, симметрия и форма ее поверхности. В третьем разделе представлены результаты расчета одночастичных состояний и долинных расщеплений в зависимости от размера и формы поверхности квантовых точек. Четвертый раздел посвящен расчету экситонных состояний и сопоставлению результатов с экспериментом. Установлено, что результаты расчета достаточно хорошо согласуются с данными по температурной зависимости спектров фотолюминесценции одиночных квантовых точек из PbS. Эта зависимость проявляется в

виде асимметричного уширения пиков люминесценции с ростом температуры за счет заселения отщепленных междолинным смешиванием экситонных состояний. В последнем разделе главы изложены результаты моделирования низкотемпературной фотолюминесценции квантовых точек в магнитном поле. И.Д. Авдеевым предложен механизм формирования анизотропных расщеплений и разброса g -факторов за счет поверхностных дефектов.

В четвертой главе приведен вывод модели формирования экситонных состояний в квантовых точках из халькогенидов свинца в рамках обобщенного $k\cdot p$ метода и проанализирована тонкая структура экситона. Модель учитывает размерное квантование состояний, долинное расщепление, и кулоновское взаимодействие электрона и дырки. Показано, что модель позволяет описать результаты расчета методом сильной связи, полученные в третьей главе. В этой главе показано, что в квантовых точках из халькогенидов свинца в спектрах оптического поглощения доминирует один триплет, названный в диссертации «сверхъярким», который отщеплен вверх по энергии и образован симметричной суперпозицией долинных состояний.

По диссертации имеются ряд замечаний:

1. В диссертации недостаточно внимания уделено составу и перекрытию орбиталей электронных и дырочных состояний вблизи экстремума зон в L долинах. Явное указание распределения орбиталей по разным атомам позволило бы лучше обосновать пренебрежение внутриатомными кулоновскими интегралами.

2. Результаты расчета состояний в нанопроволоках из $PbSe$ не были сопоставлены с экспериментом. Это не является серьезным недостатком теоретической работы, однако позволило бы лучше обосновать полученные результаты.

3. Анализ симметрии электронных, дырочных и экситонных состояний в квантовых точках из PbS приведен в 4 главе, в то время как его результаты используются в 3 главе для описания расчета методом сильной связи. Это затрудняет чтение текста диссертации.

4. Для лучшего объяснения Рис. 3.2, на котором изображена зависимость энергии уровней размерного квантования от формы и размера квантовых точек, желательно было бы привести графики локальной плотности электронных и дырочных состояний в квантовых точках.

5. Модель квантовых точек с дефектами вызывает вопросы. При расчете крайне тонких расщеплений (доли мэВ) в нулевом магнитном поле в диссертации пренебрегается анизотропией окружения квантовых точек, обусловленной зарядами-изображениями в диэлектрической матрице CdS , из которой сформирована их оболочка, и наличием подложки. То есть рассмотрен только один из возможных механизмов, приводящим к

расщеплениям.

Также имеются незначительные замечания по орфографии и пунктуации.

Указанные выше замечания не снижают общей исключительно высокой оценки диссертационной работы. Диссертационная работа И.Д. Авдеева выполнена на высоком научном уровне и вносит значительный вклад в развитие теоретических методов исследования многодолинных полупроводниковых наносистем. Основные результаты работы изложены в высокорейтинговых международных журналах (PRB, Small, Nano Letters, JAP, Faraday Discussion), доложены на многих международных и российских конференциях и семинарах.

Автореферат адекватно отражает содержание диссертации. Представленная диссертация соответствует всем требованиям ВАК РФ, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Ее автор — Иван Дмитриевич Авдеев несомненно заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 — «Теоретическая физика».

Диссертационная работа И.Д. Авдеева представлена автором на совместном научном семинаре лаборатории «Оптика спина» им. И.Н. Уральцева и кафедры физики твёрдого тела СПбГУ 28 сентября 2021 г. Настоящий отзыв на диссертационную работу И.Д. Авдеева обсужден и одобрен на совместном научном семинаре лаборатории «Оптика спина» им. И.Н. Уральцева и кафедры физики твёрдого тела СПбГУ 30 ноября 2021 г, протокол № 3.

Профессор кафедры физики твердого тела СПбГУ,
д.ф.-м.н.

В. Г. Дубровский

Профессор кафедры физики твердого тела СПбГУ
с возложением обязанностей заведующего кафедрой,
д.ф.-м.н.

С. Ю. Вербин

Секретарь семинара лаборатории Оптика спина СПбГУ,
Профессор, д.ф.-м.н.

И. В. Игнатьев

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет»

Адрес: 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7/9,

тел. (812) 363-62-58

email: science@spbu.ru

Личную подпись
В. Г. Дубровского, С. Ю. Вербина
заверяю
И.О. начальника отдела кадров №3
И.И. Константинова