

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу
Панькина Дмитрия Васильевича
«ПОЛЯРНЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ ФОНОНЫ
В СЛОИСТЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ»,
представляемой на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук
по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Актуальность темы исследования

В кандидатской диссертационной работе Панькина Д.В. представлены экспериментальные и теоретические результаты исследований полярных оптических фононов в слоистых гетероструктурах методами спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС). Актуальность данной тематики обусловлена необходимостью совершенствования бесконтактного и неразрушающего метода характеристики слоистых гетероструктур. Наличие такого метода позволяет интерпретировать спектры выращенных структур, сопоставляя экспериментально измеряемые спектральные параметры с геометрическими особенностями гетероструктур и, тем самым, оптимизировать условия синтеза и создавать гетероструктуры с заданными свойствами и минимальной дефектностью.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, девяти глав, выводов и списка использованной литературы. Во *введении* ставятся цели и задачи, решаемые в данной работе, обосновывается выбор метода. Подчеркнуто, что на данный момент одними из перспективных для применения в различных областях являются широкозонные материалы на основе нитридов галлия и алюминия, а так же гетероструктуры на их основе. Приведено обоснование целесообразности и актуальности проведенных исследований, их научная новизна. Приводятся положения, выносимые на защиту.

В *первой главе* демонстрируется практическая важность гетероструктур в различных областях. Демонстрируется перспективное техническое применение полупроводниковых гетероструктур в лазерной и детектирующей технике. Приводится перспективность применения слоистых гетероструктур на основе широкозонных нитридных материалов. Отмечается актуальность проблемы роста высококачественных гетероструктур на базе нитридов галлия и алюминия.

Во *второй главе* обсуждаются вопросы экспериментального исследования слоистых гетероструктур. Отмечаются достоинства метода спектроскопии КРС. Приводится описание экспериментальной установки, возможностей её работы в различных режимах, обоснован выбор оптимального режима регистрации спектров. Приводится методика измерения спектров КРС. Демонстрируются экспериментально зарегистрированные поляризованные спектры короткопериодных сверхрешеток (СР), содержащих информацию об акустических, интерфейсных и конфейнметных фононах.

В *третьей главе* изложены теоретические подходы к описанию фононов в гетероструктурах. Приводится краткий обзор с описанием основных идей, лежащих в основе как дискретных методов (квантово-механических расчетов из первых принципов и расчетов в рамках динамики решетки), так и континуальных эмпирических моделей. Делается вывод, что для описания систем, состоящих из большого числа атомов, континуальные модели в настоящее время более предпочтительны. Приводится краткое описание моделей упругого, механического и диэлектрического континуума. Отмечены возможности характеристики особенностей выращенных гетероструктур с помощью данных моделей. Изложение теории дополняется представлением экспериментальных данных, полученных в данной работе. Выделяются достоинства и недостатки разных континуальных моделей, и делается вывод о перспективности использования модели диэлектрического континуума (МДК) для описания полярных оптических фононов и сопоставления их спектра с особенностями выращенной структуры.

В *четвертой главе* дано развернутое теоретическое описание МДК. Приведен краткий обзор применений данной модели к описанию различных гетероструктур с плоскими интерфейсами, классификация наиболее часто встречающихся на практике модельных систем. Выводятся общие свойства решений уравнений, лежащих в основе МДК. К первому свойству относятся соотношения для компонент электрических полей, индуцируемых полярными фононами; соотношения, которые справедливы независимо от наличия в материалах слоев анизотропии. Второе свойство более специфично и относится лишь к решениям уравнений МДК для бинарных гетероструктур из изотропных материалов. Показано, что выведенные в работе свойства значительно упрощают процедуру решения уравнений МДК.

Пятая глава демонстрирует применение МДК к гетероструктурам, составленным из изотропных слоев. Рассмотрение включает следующие модельные гетеросистемы: изолированный гетеропереход, одиночная квантовая яма, множественная квантовая яма (МКЯ), сверхрешетка (СР). Автором последовательно изложе-

ны результаты применения модели МДК для всех приведенных выше случаев в зависимости от геометрических характеристик гетероструктуры и фононных свойств материалов слоев. Приводится объяснение наблюдаемых зависимостей фононного спектра от особенностей строения рассматриваемых гетероструктур. Рассмотрен предельный переход геометрических и фононных свойств МКЯ и СР при росте числа слоев. Демонстрируется проявление описанных в четвертой главе общих свойств решений МДК. Показано, что в гетероструктурах из изотропных материалов существуют интерфейсные фононы – фононы, сопровождающиеся электрической волной, имеющей затухающий характер по мере удаления от интерфейсов.

В *шестой главе* приведены результаты теоретических расчетов в рамках МДК для модельных структур с одноосной анизотропией в направлении, перпендикулярном интерфейсам. Показывается, что появление анизотропии приводит к появлению качественно нового типа фононов – квазиконфайнментных фононов, в которых характер электрического поля в одних слоях является распространяющимся, а в других – затухающим. Продемонстрировано, что при наличии анизотропии разделение уравнений МДК на фононную часть, определяемую чисто фононными свойствами материалов, и геометрическую, определяемую чисто геометрическими характеристиками гетероструктуры, возможно только в предельном случае длинноволновых фононов. В случае фононов с конечной длиной волны в уравнениях МДК происходит смешение этих двух факторов. Приведены результаты моделирования фононных спектров модельных структур в широком диапазоне изменений геометрических размеров. Для случая СР продемонстрирована возможность использования данных расщепления частот полярных оптических фононов для характеристики периода выращенной структуры, выявлены границы применимости использования частот полярных оптических фононов для оценки размеров гетероструктур.

В *седьмой главе* диссертации на примере СР нитридов галлия и алюминия рассмотрено влияние механических напряжений, возникающих в материалах слоев при росте бинарных СР, на частоты полярных оптических фононов. В рамках континуального подхода автором анализируются величины деформаций в слоях, приводится сравнение с экспериментальными данными. С учетом определенных деформаций в рамках МДК проведен расчет фононных частот. На основании полученных результатов сделан вывод, что полярные фононы с синфазными атомными смещениями в соседних слоях слабо подвержены влиянию деформаций, и это позволяет использовать их параметры для оценки соотношения толщин слоев.

В то же время для оценки величин деформаций в слоях больше подходят полярные оптические фононы с антифазными атомными смещениями.

В *восьмой главе* автором анализируется влияние буферных слоев на частоты полярных оптических фононов в рамках МДК. Приводится способ модификации уравнений МДК, позволяющий определить частоты полярных оптических фононов в гетероструктурах, выращенных на толстых буферных слоях. На примере моделирования конкретных МКЯ из изотропных и анизотропных (сфалеритных и вюрцитных) нитридов галлия и алюминия демонстрируется важность учета влияния буферных слоев в практически важном длинноволновом пределе. Рассмотрен предельный переход к случаю одиночной квантовой ямы и СР, определены области возможных частот полярных оптических фононов.

В *девятой главе* рассматривается влияние размытости интерфейсных границ на частоты делокализованных оптических фононов. Предложен способ соответствующей модификации стандартного подхода в рамках МДК. По результатам проведенных расчетов предсказано появление новых мод, связанных с наличием переходных слоев конечной толщины. Показано, что по значениям частот таких фононов можно оценить степень размытости (толщину) интерфейсов.

В разделе *заключение* сформулированы основные результаты диссертации.

Список цитируемой литературы включает 134 наименования.

Научная новизна полученных результатов

Все представленные в диссертационной работе результаты являются оригинальными и открывают перспективы дальнейших исследований. В плане новизны особенно хочется выделить следующие результаты:

- оценка влияния структурных параметров слоистых гетероструктур на частоты полярных оптических фононов, установление количественных соотношений между этими параметрами и спектральными характеристиками фононов различных типов;
- получение в рамках модели диэлектрического континуума количественных соотношений, существенно упрощающих расчет частот полярных оптических фононов в слоистых гетероструктурах.

Обоснованность и достоверность научных положений и выводов

Достоверность полученных в рамках данной работы результатов подтверждается их внутренней непротиворечивостью, согласием теоретических и эксперимен-

тальных данных, полученных как в рамках предшествующих работ, так и в рамках выполненных автором исследований.

Прикладная значимость полученных результатов

Установленные диссертантом количественные соотношения между структурными параметрами гетероструктур и сверхрешеток и характеристиками спектров КРС на полярных оптических фононах позволяют на практике бесконтактным локальным методом производить оперативный контроль параметров синтезируемых гетероструктур.

Полученные соотношения параметров «структура – свойство» существенно упрощают расчеты колебательных спектров этих систем и позволяют осуществить предсказание фононных свойств.

Возможные применения полученных результатов

Полученные в диссертации результаты можно использовать как в дальнейших теоретических исследованиях структурных особенностей гетероструктуры, так и при разработке и улучшении технологий роста и контроле выращиваемых гетероструктур. Кроме того, материал диссертации целесообразно использовать как методический материал для объяснения методики расчета спектральных характеристик полярных оптических фононов в рамках модели диэлектрического континуума.

По теме диссертации опубликовано 4 статьи, материал доложен на 10 конференциях. Основные результаты работы докладывались и обсуждались на профильных международных и российских научных конференциях и симпозиумах, хорошо известны специалистам.

Диссертация изложена ясным и грамотным языком, хорошо иллюстрирована. Автореферат достаточно полно отражает содержание диссертации.

При чтении диссертации возникли следующие замечания:

1. В табл. 1. на стр. 25 диссертации приведены «геометрии съемки спектров КРС, позволяющие наблюдать моды разной симметрии», однако приведенные геометрии далеко не исчерпывают всех возможностей. Например, по ссылке 68 приведен существенно более полный набор (в списке публикаций ссылка приведена не точно: это не Appl. Phys. Lett., а J. Appl. Phys.). Почему автор ограничился только приведенными в таблице геометриями – неясно.

2. На той же странице 25 отмечено, что «в зависимости от направления волнового вектора можно выделить фононы, распространяющиеся вдоль направления периодичности, и фононы, распространяющиеся в плоскости интерфейса. Из полярных фононов в вюрцитных материалах GaN и AlN к первому типу относятся моды $E_1(\text{TO})$ и $A_1(\text{LO})$, а ко второму – $E_1(\text{LO})$ и $A_1(\text{TO})$.» Однако, поскольку фононы E_1 являются вырожденными, то $E_1(\text{TO})$ фонон может распространяться и в плоскости интерфейса (что, в частности, было отмечено и в той же публикации 68).
3. На стр. 119 в комментарии к рис. 7.1 (зависимость деформаций в слое от соотношения толщин слоев) отмечается, что эта зависимость имеет линейный характер. Но, поскольку расчетная зависимость получена на основании закона Гука, то она другой и быть не может, а по приведенным экспериментальным данным можно провести практически любую кривую. Так что данный комментарий особого смысла не имеет.

Отмеченные недостатки не затрагивают основного содержания выполненных исследований и не снижают общего положительного впечатления. Диссертация Панькина Дмитрия Васильевича «Исследование полярных оптических фононов в слоистых гетероструктурах» является выполненным на соответствующем уровне научным исследованием. Проведенные исследования, новизна и значимость результатов, приведенных в диссертации, удовлетворяют всем требованиям положения ВАК о порядке присуждения ученых степеней, что дает основания для присвоения диссертанту ученой степени кандидата физико-математических наук.

Отзыв составил официальный оппонент
доктор физ.-мат. наук, старший научный сотрудник,
главный научный сотрудник лаборатории молекулярной спектроскопии
Института физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения РАН
– обособленного подразделения ФИЦ КНЦ СО РАН,
г. Красноярск, 660036, г. Красноярск, ул. Академгородок, д. 50/38.
Тел. +7 (908) 200 4440, эл. почта vtyurin@iph.krasn.ru

А. Н. Втюрин

17 апреля 2018 г.

Подпись *А. Н. Втюрина* заверяю
Ученый секретарь ИФ СО РАН



А. О. Злотников