

## УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной деятельности  
ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский)  
федеральный университет»  
профессор \_\_\_\_\_ Нургалиев Д.К.  
« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2017 года

## ОТЗЫВ

ведущей организации по диссертации Барышникова Кирилла Александровича «Релаксационные и резонансные переходы в ян-теллеровских центрах в кубических полупроводниках», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников

Хорошо известно, что свойства кристаллических полупроводников в значительной степени определяются примесями, содержащимися в них. В такой ситуации чрезвычайно важными оказываются методики контроля состава и концентрации примесей в полупроводниках. Одной из таких чувствительных методик, применимых для примесей, образующих центры, проявляющие эффект Яна-Теллера, оказалось поглощение ультразвука. Однако, не все результаты по спектрам поглощения и релаксации были понятны. К таким, выявленным недавно и требующим объяснения случаям, относились примесные центры  $\text{Cu}^{2+}$  в GaAs и  $\text{Cr}^{2+}$  в ZnSe. Поэтому теоретические исследования, результаты которых представлены в диссертационной работе Барышникова К.А., являются **актуальными и своевременными**.

Диссертация посвящена теоретическому объяснению эффектов переориентации и квантовомеханического туннелирования примесных и вакансионных комплексов в кубических полупроводниковых кристаллах. В работе подробно исследуется влияние ультразвуковых волн, распространяющихся в кристалле, внешних магнитных полей и других взаимодействий на ян-теллеровские центры  $\text{Cu}^{2+}$  и  $\text{Cr}^{2+}$ .

Во **введении** к диссертации сформулированы основы исследуемого эффекта Яна-Теллера, наблюдавшегося на многих глубоких точечных дефектах в полупроводниковых кристаллах. Приводится теорема Яна-Теллера и обсуждаются ее основные следствия, вводятся необходимые понятия и представления. Обсуждается принципиальная

возможность использования ультразвуковой экспериментальной методики для детектирования ян-теллеровских центров в кристаллах. Обосновывается актуальность темы исследования и обозначается степень ее проработанности, формулируются цель работы и решаемые задачи, подчеркивается научная новизна и практическая значимость полученных результатов; перечислены основные методы исследования. Сформулированы положения, выносимые на защиту, и приведен список публикаций автора по теме диссертации.

В **главе 1** обсуждаются основные задачи, возникающие при анализе ян-теллеровских систем с электронными  $d$ -состояниями в кубических кристаллах арсенида галлия и селенида цинка. Для центра  $\text{Cu}^{2+}$  в арсениде галлия получен оригинальный результат: исследован спектр его вибронных состояний с учетом обменного взаимодействия между дырками, локализованными на центре. Изучено туннелирование между эквивалентными ян-теллеровскими конфигурациями примесного комплекса  $\text{Cu}+4\text{As}$ . Показана чувствительность величины и знака туннельного расщепления энергетических уровней центра от величины обменного взаимодействия между дырками.

В **главе 2** приводится теория поглощения звука ян-теллеровскими центрами в полупроводниках. Автором выполнен расчет коэффициентов релаксационного и резонансного поглощения ультразвука с разной поляризацией, распространяющегося в кристалле арсенида галлия, легированного медью. Приводятся оценки параметров центра  $\text{Cu}^{2+}$ , в том числе оценка величины туннельного расщепления для центра  $\text{Cu}^{2+}$  в арсениде галлия, составляющая 15 мкэВ. Обсуждаются экспериментальные и теоретические методы определения времени релаксации ян-теллеровского комплекса с помощью ультразвуковой экспериментальной методики на примере вакансионных комплексов в селениде цинка. Обсуждается различие вкладов активационного механизма и туннельного механизма релаксации в температурную зависимость времени релаксации комплекса.

В **главе 3** представлена теоретическая модель центра  $\text{Cr}^{2+}$  в кристалле селенида цинка. В оригинальной части обсуждается поглощение звука комплексом  $\text{Cr}+4\text{Se}$  как в отсутствие, так и при наличии приложенного магнитного поля. Доказывается отсутствие туннелирования между ян-теллеровскими конфигурациями комплекса в нулевом магнитном поле при низких температурах. Показано, что релаксация комплекса из одной конфигурации в другую происходит за счет однофононных переходов в ближайшее возбужденное состояние, отщепленное от основного состояния комплекса по энергии вверх на величину 0.9 мэВ. Также в главе обсуждается возникновение нового эффективного канала релаксации между ян-теллеровскими конфигурациями центра  $\text{Cr}^{2+}$  за счет орбитального смешивания электронных состояний центра в магнитном поле,

направленном вдоль оси [110]. Показано, что такое магнитоиндуцированное туннелирование приводит к увеличению поглощения звука центрами  $\text{Cr}^{2+}$  в ZnSe в магнитных полях до 0.1 Тл при температуре ниже 8 К. Кроме того, в главе обсуждается переход к «хвосту» резонансного поглощения звука этими центрами в магнитном поле, направленном вдоль оси [001].

В **Заключении** приводится общий вывод и основные результаты работы.

По диссертации Барышникова К.А. возникли следующие вопросы и замечания:

1. В формулировке первого положения, выносимого на защиту, не совсем понятным является смысл последнего предложения: «Такой критический параметр существует для центра  $\text{Cu}_{\text{Ga}}^{2+}$  в GaAs». В чем состоит «критичность» (и какого) параметра?
2. В оригинальной части I главы, посвященной решению вибронной  $(\Gamma_8+\Gamma_8) \otimes e$  задачи о двух дырках на примеси меди в GaAs, следует ли считать ситуацию при ненулевом обменном взаимодействии между дырками проявлением псевдоэффекта Яна-Теллера? Ведь в этом случае вибронные эффекты рассматриваются на расщепленных в неискаженной конфигурации состояниях.
3. В этой же главе на стр. 44 диссертации приведено полученное автором выражение (1.32) для величины туннельного расщепления, знак которого в зависимости от величины эффективной обменной константы может быть как положительным, так и отрицательным. Как следствие, основным вибронным уровнем системы может оказаться либо вибронный синглет  $A_1$ , либо дублет  $E$ . Первый вариант отвечает *положительному* значению туннельного расщепления  $\hbar\omega_0$ , второй – *отрицательному*. Далее по тексту в связи с тем, что реальные параметры исследуемой системы выходят за границы применимости выражения (1.32), были выполнены численные расчеты величины туннельного расщепления за рамками приближения об одномерном туннелировании, результаты которых приведены в таблице 1.1 в сравнении с величинами, рассчитанными, следуя выражению (1.32). Результаты двух подходов в самом деле различны. Однако, смущает интерпретация на стр. 48 *отрицательной* величины туннельного расщепления, полученной численным методом (последний столбец таблицы 1.1), как реализация основного состояния в виде вибронного синглета  $A_1$ , а *положительной* – в виде дублета  $E$ . Это находится в противоречии с очевидной интерпретацией знаков на стр. 43-44. Есть ли здесь неточность, и если есть, то где?
4. На стр. 43 уравнения (1.28) и (1.29) должны домножаться на комплексно-сопряженные волновые функции.

5. Возможно, не совсем удачно выбрано обозначение операторов  $\hat{L}_\theta$ ,  $\hat{L}_c$  и других на стр. 83, так как можно подумать, что это линейные комбинации операторов орбитального момента дырки. На самом деле, как следует из текста, это квадратичные комбинации операторов орбитального момента.
6. На стр. 92 в левой части выражения (3.11) должен стоять квадрат модуля матричного элемента, а не сам матричный элемент.
7. Автор использует некоторые жаргонизмы. Например, на стр. 4 «энергии этих состояний образуют узкие линии в спектре электронных состояний полупроводника»; на стр. 6 и стр. 61 используются сходные выражения «квантовомеханическое смешивание электронных состояний с колебаниями ядер» и «смешивание электрона с искажающими комплекс модами».

Кроме того, в диссертации допущено несколько мелких неточностей: например, на стр. 7 вместо «прописной буквой» следует использовать «строчной буквой». Есть небольшое количество опечаток.

Также следует отметить, что на стр. 22 в списке «других публикаций» автора под номером 19, видимо, по ошибке, указана статья в журнале Applied Magnetic Resonance, который входит в перечень ВАК, которую следовало бы представить в списке основных опубликованных работ по теме диссертации.

Отмеченные замечания не отражаются на результатах и выводах диссертации, а касаются скорее ее оформления.

Результаты диссертации апробированы на многочисленных международных и всероссийских научных конференциях, опубликованы в шести статьях в журналах, рекомендованных ВАК. Достоверность полученных результатов определяется использованием классических, хорошо зарекомендовавших себя, подходов к решению вибронных задач, дополняющих их численных методов, непротиворечивостью достигнутых заключений. Несомненным преимуществом является непосредственное взаимодействие при выполнении исследований с коллективом экспериментаторов. Определенным «знаком качества» следует считать соавторство в опубликованных работах с патриархом исследований в области вибронных взаимодействий со времен Советского Союза – профессором Исааком Борисовичем Берсукером.

Диссертация выполнена на высоком научном уровне. Сделанные выводы не вызывают сомнений. Диссертация Барышникова К.А. представляет собой законченное научно-квалификационное исследование, в котором решены задачи построения микроскопической теории эффекта Яна-Теллера для примеси  $\text{Cu}^{2+}$  в арсениде галлия с учетом обменного взаимодействия между дырками, локализованными на данном центре, и

поглощения ультразвука этими примесными центрами, а также объяснена сильная зависимость поглощения ультразвука центрами  $\text{Cr}^{2+}$  в кристаллах ZnSe. Диссертационная работа Барышникова К.А. соответствует специальности 01.04.10 – физика полупроводников.

**Результаты диссертационной работы** Барышникова К.А. представляют интерес для таких организаций, как ФГБУН Институт общей физики им. А.М.Прохорова РАН, г. Москва, ФГБУН Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН, г. Москва, ФГБУН Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, г. Санкт-Петербург, ФГБУН Институт физики полупроводников им. А.В.Ржанова СО РАН, г. Новосибирск, ФГБУН Институт неорганической химии им. А.В.Николаева СО РАН, г. Новосибирск, ФГБУН Институт геологии и минералогии СО РАН, г. Новосибирск, ФГАОУ ВО Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, ФГАОУ ВО Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону, ФГАОУ ВО Казанский федеральный университет, г. Казань и др.

Диссертационная работа К.А. Барышникова «Релаксационные и резонансные переходы в ян-теллеровских центрах в кубических полупроводниках» удовлетворяет требованиям п.9 «Положения ВАК о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013 г., а ее автор, Барышников Кирилл Александрович, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников.

Результаты диссертации К.А. Барышникова «Релаксационные и резонансные переходы в ян-теллеровских центрах в кубических полупроводниках» были представлены на семинаре кафедры квантовой электроники и радиоспектроскопии ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет»; отзыв заслушан и одобрен, протокол № 3 от 13.10.2017 г.

Отзыв составили:

Старший научный сотрудник Центра  
квантовых технологий КФУ,  
кандидат физико-математических наук,  
доцент

Юсупов Роман Валерьевич

Заведующий кафедрой квантовой  
электроники и радиоспектроскопии КФУ,  
доктор физико-математических наук,  
профессор

Тагиров Мурат Салихович

31.10.2017 г.

420008, Казань, ул. Кремлевская, 18

Телефон: +7 843 233-73-27, e-mail: Roman.Yusupov@kpfu.ru