

О Т З Ы В

официального оппонента на диссертацию

Штанг Татьяны Владимировны

на тему:

«Моделирование процессов заряжения и люминесценции при облучении электронами наноструктурных оксидов кремния и алюминия»

представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности

01.04.07 - «Физика конденсированного состояния»

1. Актуальность темы диссертации.

Соискатель правильно обосновывает актуальность темы своей диссертации тем, что оксиды кремния и алюминия являются практически ценными и широко используемыми соединениями, а их исследование в наноструктурированном состоянии соответствует современным тенденциям развития физики конденсированного состояния вещества. Сами изучаемые физические явления в названных материалах, такие как заряжение и люминесценция при электронном облучении также представляют большой научный и практический интерес, так как они являются рабочими или сопутствующими явлениями в различных технических приложениях. Поэтому цель диссертационного исследования «изучение методами компьютерного моделирования и люминесцентной спектроскопии процессов заряжения и спектрально-кинетических характеристик катодо- и фотолюминесценции наноструктурных оксидов алюминия и кремния», несомненно, является актуальной научной задачей.

2. Структура, содержание и результаты работы.

Диссертация написана на 140 страницах текста компьютерного набора и содержит титульный лист, оглавление, введение, четыре главы,

Вх. № 05 - 19/1 - 266
от 20.11.14 г. 1

заключительный раздел и список цитированной литературы из 114 наименований.

Во введении сформулированы цель и конкретные задачи работы, дана ее краткая характеристика, сформулированы защищаемые научные положения, проанализированы новизна и практическая ценность результатов работы, отражен личный вклад соискателя, приведена информация о научной апробации и публикациях автора по теме диссертации.

В первой главе «Взаимодействие электронных пучков и квантов ВУФ диапазона с широкозонными оксидами», которая является литературным обзором, описано состояние исследований процессов заряжения диэлектрических соединений и влияния заряжения на свойства последних, а также физического и математического моделирования этих процессов и свойств. Отмечается, что подобные процессы исследованы на монокристаллических соединениях, но не изучены на наногабаритных диэлектрических структурах. Влияние на катодолюминесценцию процессов заряжения поверхности и приповерхностных слоев оксидов алюминия и кремния под действием электронного пучка практически не изучено. Отсутствуют исследования изменений катодолюминесценции в наноразмерных образцах данных соединений по сравнению с объемными монокристаллами.

Проведенный обзор позволил соискателю обосновать и конкретизировать задачи собственных исследований.

Во второй главе «Развитие физических моделей и разработка алгоритмов расчета процессов заряжения и люминесценции кристаллических и наноструктурных диэлектриков» вначале описываются физические явления и свойства вещества, чувствительные к размерному фактору и кратко раскрываются механизмы этой чувствительности. Рассмотрены такие процессы, как рассеяние электронов на границах наночастиц, изменение глубины центров захвата, изменение фононного спектра и такие характеристики, как длина свободного пробега и эффективная масса

носителей, ширина запрещенной зоны и другие. Процессы заряжения наноструктурных диэлектриков при электронной бомбардировке связаны с токами различной природы, которые должны учитываться в предлагаемых моделях. В диссертации, как и в других известных работах, ранее сделанных на однородных объемных образцах, рассматриваются следующие токи: ток первичных электронов, входящих в образец из внешнего источника, ток вторичных электронов, дырочный ток, ток Пула-Френеля и ток Фаулера-Нордгейма. Новым в математической модели и алгоритме расчета заряжения диэлектриков в диссертации является блок, учитывающий наноструктурное состояние исследуемых образцов. В результате алгоритм Штанг получился более универсальным. С его помощью можно моделировать заряжение как однородных объёмных, так и наноструктурных диэлектрических образцов.

В этой же главе описаны математические модели и соответствующие алгоритмы, разработанные автором для расчета спектрально-кинетических характеристик люминесценции при импульсном возбуждении, а также при стационарном непрерывном возбуждении однородных объёмных, а также наноструктурных диэлектриков.

В третьей главе «Основные закономерности процессов заряжения поверхности и поверхностных слоев наноструктурных оксидов кремния и алюминия при облучении пучком электронов» проводится апробация физической модели, алгоритмов расчета и разработанного программного обеспечения на примерах расчетов основных параметров заряжения для объемных кристаллических образцов диоксида кремния и сапфира, подвергнутых электронной бомбардировке. Полученные значения глубины проникновения заряда, его объемной плотности, напряженности электрического поля, динамики токов хорошо соответствуют литературным данным. Затем на апробированных таким образом моделях и алгоритмах исследуется заряжение наноструктурных образцов Al_2O_3 и SiO_2 . В данной главе, в частности, показано, что уменьшение плотности заряда и напряженности вызванного им электрического поля в приповерхностном

слое наноструктурных оксидов алюминия и кремния по сравнению с монокристаллическими образцами обусловлено изменением ширины запрещенной зоны в наночастицах и рассеянием электронов на их границах. Весь комплекс результатов, полученных при моделировании заряжения свидетельствует о том, что наноструктуры оксидов кремния и алюминия более устойчивы к облучению, чем монокристаллы. В наноструктурах больше глубина проникновения заряда, меньше его плотность и напряженность индуцированного поля. Эти результаты хорошо коррелируют с известными фактами увеличения радиационной и электрической прочности в наноструктурных диэлектриках и полупроводниках.

В четвертой главе «Моделирование катодо- и фотолюминесценции наноструктурных оксидов кремния и алюминия. Сравнение с экспериментом» вначале описываются методы приготовления нанопорошков и монокристаллов $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ и их предварительного тестирования. Значительно менее подробно описаны и охарактеризованы образцы диоксида кремния, их приготовление и свойства. Далее описываются методики экспериментальных исследований. Затем на основе разработанных моделей проводятся расчеты спектрально-кинетических характеристик люминесценции для различных условий возбуждения и различных механизмов высвечивания. Показано, в частности, что при облучении наноструктурных оксидов алюминия и кремния нвносекундными импульсами электронов высокой плотности формируется отрицательный заряд у поверхности, вызывающий увеличение времени послесвечения рекомбинационной люминесценции. Величина объемной плотности заряда и напряженности электрического поля на порядок меньше, чем при стационарном облучении электронами средних энергий из-за меньшего флюенса электронов и интенсивной рекомбинации электронно-дырочных пар.

В заключительном разделе «Основные результаты и выводы диссертационной работы» суммированы полученные результаты.

Список использованной литературы охватывает основной круг отечественных и зарубежных публикаций по теме диссертационного исследования.

3. Степень обоснованности, достоверность, научная новизна и практическая ценность положений и выводов, сформулированных в диссертации.

Научные положения автора, вынесенные на защиту, в основном доказаны. Их достоверность, в частности, подтверждается в специальном разделе диссертации «2.4 Оценка воспроизводимости расчетов параметров заряжения и люминесценции широкозонных оксидов». Мерой воспроизводимости являются величины среднего квадратичного отклонения, дисперсии и стандартного отклонения.

Автор диссертации, проводя расчеты для наноструктурных объектов, предварительно апробировал используемые развитые им модели на монокристаллах, для которых были известны экспериментальные результаты, что повышает достоверность полученных результатов.

Полученные соискателем научные результаты являются новыми. Они имеют важное значение для физики конденсированного состояния и ее приложений.

4. Конкретные рекомендации по использованию результатов и выводов диссертации.

Можно согласиться с автором в том, что разработанные им и зарегистрированные в установленном порядке программные комплексы можно применять для расчетов заряжения поверхности и оценки электрической прочности широкого круга монокристаллических и наноструктурных оксидных диэлектриков при облучении электронами. Физические закономерности, установленные соискателем, представляют

интерес и должны учитываться при проектировании и разработке устройств, в которых наноструктурные материалы используются в сильных радиационных полях. Целесообразно рекомендовать результаты работы к использованию в научных и образовательных учреждениях, изучающих взаимодействие интенсивных потоков радиации с диэлектрическими средами, таких как Институт сильноточной электроники СО РАН, Институт электрофизики УРО РАН, Томский политехнический университет, Иркутский государственный университет и др.

5. Недостатки в содержании и оформлении диссертации.

Диссертационная работа не лишена некоторых недостатков.

5.1. По-видимому, в заголовке 2.3.1 (стр. 46) неправильно использован термин «Внутрицентровая люминесценция». Таким термином обычно характеризуют фотолюминесценцию, которая возбуждается и высвечивается вследствие квантовых переходов внутри центра. На самом деле, в разделе 2.3.1 рассматривается люминесценция, возбуждаемая за счет межзонных переходов с образованием электронов и дырок. Следовательно, люминесценцию, возбуждаемую при рекомбинации электронов и дырок на центрах свечения, в этом случае надо называть рекомбинационной. По-видимому, автор пытался выделить такой случай рекомбинационной люминесценции, при котором время миграции носителей к центрам свечения значительно меньше времени жизни возбужденного состояния и вся длительность свечения фактически определяется лишь внутрицентровыми процессами.

5.2. Вызывают вопросы данные таблицы 4.3 (стр. 110), где приведены величины времени затухания люминесценции F-центров в монокристалле $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ и наночастицах того же материала различных размеров. Казалось бы, с увеличением размеров наночастиц время затухания люминесценции F-центров в них должно приближаться к значению этой величины для монокристаллов. Однако, уже для сравнительно крупных наночастиц с

размером 50 нм, свойства которых должны приближаться к свойствам объемных материалов, мы видим в таблице значения, различающиеся в триста тысяч раз! Это надо комментировать. Если на самом деле имеются такие различия, размерный ряд исследуемых наночастиц следовало бы расширить в сторону увеличения размеров до таких, при которых частицы и монокристалл имеют уже одинаковые свойства.

5.3. Не понятно, почему в случае повторного захвата электронов на ловушках, время затухания люминесценции уменьшается, а не увеличивается (стр. 114). Не могут ведь электроны в зоне проводимости жить дольше, чем в ловушках.

6. Заключение о соответствии диссертации установленным критериям.

В целом диссертационная работа Татьяны Владимировны Штанг, выполненная в известной научной школе по радиационной физике твердого тела под научным руководством доктора физико-математических наук профессора Кортова Всеволода Семеновича, представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, в которой решена задача изучения методами компьютерного моделирования и люминесцентной спектроскопии процессов заряжения и исследования спектрально-кинетических характеристик катодо- и фотолюминесценции наноструктурных оксидов алюминия и кремния, имеющая важное значение для физики конденсированного состояния и ее приложений. Содержание работы соответствует формуле специальности ВАК 01.04.07 – Физика конденсированного состояния», отраженной в ее паспорте, а область исследований соответствует п. 2 паспорта «Теоретическое и экспериментальное исследование физических свойств неупорядоченных неорганических и органических систем, включая классические и квантовые жидкости, стекла различной природы и дисперсные системы». Результаты

работы в достаточной мере опубликованы в научной печати, на разработанные программные продукты получены свидетельства государственной регистрации. Автореферат правильно отражает содержание диссертации. Таким образом, представленная диссертационная работа полностью соответствует требованиям, сформулированным в разделе II Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г., предъявляемым к кандидатским диссертациям, и ее автор, Штанг Татьяна Владимировна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Официальный оппонент –

Заведующий Иркутским филиалом
федерального государственного бюджетного
учреждения науки Института лазерной физики
Сибирского отделения Российской академии
наук, докт. физ.-мат. наук, профессор



Мартынович Евгений Федорович

664033, Иркутск, ул. Лермонтова, д. 130а, ИФ ИЛФ СО РАН,
тел. (3952) 512160, факс. (3952) 511438, моб. 89643582005, адрес эл. почты –
filial@ilph.irk.ru

12.11.2014 г.