

«УТВЕРЖДАЮ»

врио Директора ФГБУН ИАиЭ СО РАН



Донцова Е.И.

12 2025 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертационную работу

**Подшивайлова Эдуарда Андреевича «Теоретические модели
долговременных изменений параметров люминесценции в одиночных
полупроводниковых квантовых точках и нанокристаллах» на соискание
учёной степени кандидата физико-математических наук по
специальности 1.3.17 «Химическая физика, горение и взрыв, физика
экстремальных состояний вещества»**

Диссертация Подшивайлова Э.А. посвящена одному из активно развивающихся разделов современной науки – исследованию полупроводниковых квантовых точек и нанокристаллов со структурой перовскита. Актуальность данной работы весьма высока и связана с растущим интересом к использованию таких объектов в качестве лазеров, сенсоров, источников одиночных фотонов, а также в качестве перспективной элементной базы для солнечных батарей. При этом задача построения полных теоретических моделей наблюдаемых эффектов в таких системах далека от завершения.

Целью работы являлось построение теоретических моделей долговременных процессов изменения параметров люминесценции в одиночных полупроводниковых нанокристаллах, дающих как качественное, так и количественное согласие с экспериментальными данными.

Общая характеристика и содержание работы.

Диссертационная работа соответствует паспорту специальности 1.3.17 «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» по пунктам 1 и 2.

Структурно диссертация состоит из Введения, шести Глав, Заключения, Списка используемых сокращений, Списка литературы и трёх Приложений. Общий объём диссертации составляет 125 страниц, включая 54 рисунка. Список литературы содержит 170 наименований.

Во **Введении** обосновывается актуальность диссертационного исследования; формируется цель и основные задачи работы; характеризуются научная новизна работы и её теоретическая и практическая значимость; описывается предлагаемая автором методология решения поставленных задач; сформулированы защищаемые положения, их апробация и степень достоверности. Кроме того, даётся краткое изложение содержания диссертации.

В **Главе 1** даётся обзор исследований, посвящённых наблюдению и описанию эффектов спектральной диффузии и мерцания люминесценции в квантовых точках. Описаны основные существующие модели спектральной диффузии (переключение ансамбля двухуровневых систем, квантово-ограниченный эффект Штарка) и мерцания (модель DCET, механизм захвата, модель горячих носителей), а также методика анализа распределения время жизни флуоресценции – интенсивность (FLID) для определения механизма мерцания.

Глава 2 посвящена описанию схемы для проведения время-коррелированных измерений люминесценции квантовых точек, а также методов измерения спектральной плотности мощности сигнала люминесценции. Кроме того, в разделе 2.4 описана процедура построения двумерных распределений FLID с учётом наличия двух компонент люминесценции – быстрой и задержанной.

Глава 3 посвящена построению модели спектральной диффузии квантовых точек CdSe/ZnS (ядро/оболочка). Наблюдаемая линейная корреляция между шириной спектра и его смещением объяснена в рамках феноменологического предположения о медленном дрейфе параметров электрон-фононного взаимодействия. Показано, что модель обладает хорошей предсказательной силой в широком диапазоне температур.

В **Главе 4** предлагается модель мерцания люминесценции одиночных квантовых точек CdSeS/ZnS с экспоненциальным затуханием. В её основе лежит одновременный учёт механизмов рекомбинации носителей заряда как с излучением фотона, так и безызлучательно через многофононный каскадный захват. На основе решения системы кинетических уравнений для ансамбля двухуровневых систем с переключениями получены выражения для корреляционных функций фотоотсчётов, спектральной плотности мощности и

распределения фотоотсчётов со свободными параметрами, которые могут быть найдены из аппроксимации экспериментальных данных. Показано одновременное воспроизведение основных особенностей экспериментально наблюдаемых характеристик люминесценции – распределения фотоотсчётов, спектральной плотностей мощности и распределений FLID.

В **Главе 5** описывается модификация модели, построенной в предыдущей Главе, для учёта явления задержанной компоненты люминесценции, наблюдающейся в одиночных перовскитных нанокристаллах CsPbBr_3 . Для этого автор предлагает модель безызлучательной рекомбинации на глубокой и мелкой ловушках с медленно меняющимися во времени кинетическими коэффициентами. Полученные из экспериментальных данных оценки свободных параметров модели позволяют добиться хорошего сходства с экспериментом, обнаружив при этом корреляцию между быстрой и задержанной компонентами.

Заключительная **Глава 6** посвящена обсуждению явления полностью оптического переключения люминесценции в перовскитных нанокристаллах с избытком свинца. Автором предложена феноменологическая модель, включающая образование и распад случайных дефектов, могущих выступать в качестве глубоких ловушек, которые могут взаимодействовать с контрольным излучением и тем самым осуществлять оптическое переключение нанокристалла. Для одномерного случая проведено численное моделирование сначала в приближении быстрой (по сравнению со скоростью безызлучательной рекомбинации носителей заряда) диффузии, а затем в общем случае. Показано, что приближение быстрой диффузии не в состоянии объяснить наблюдающиеся экспериментальные особенности оптического переключения люминесценции, такие как форма кривой оптического восстановления и зависимость скорости восстановления от интенсивности контрольного излучения. В то же время результаты численного решения общей модели качественно воспроизводят основные особенности экспериментальных данных.

В **Заключении** кратко суммируются результаты работы.

Приложения содержат иллюстрации и графики, дополняющие результаты, сформулированные в основной части работы.

Новизна исследования и результаты.

Диссертационная работа Подшивайлова Э.А. затрагивает ряд актуальных вопросов, посвящённых оптическим характеристикам полупроводниковых

квантовых точек и одиночных нанокристаллов. Автором предложен ряд оригинальных феноменологических моделей, которые в состоянии воспроизвести и объяснить основные особенности наблюдаемых эффектов люминесценции – а именно, спектральную диффузию, вид спектральной плотности мощности, мерцания люминесценции и эффект оптического переключения. В частности, были получены следующие наиболее важные результаты:

- 1) Спектральная диффузия одиночных полупроводниковых квантовых точек CdS/ZnS объяснена в рамках модели медленно-флуктуирующего параметра электрон-фононного взаимодействия. Показано, что модель описывает корреляции между наблюдаемыми в эксперименте ширинами и положениями пиков люминесценции в широком диапазоне температур.
- 2) Эффект мерцания люминесценции перовскитных нанокристаллов описан в рамках аналогичной модели, что позволило предсказать функцию распределения фотоотсчётов, спектральную плотность мощности и двумерные распределения время жизни – интенсивность люминесценции. Впервые достигнуто согласие с экспериментальными данными по всем перечисленным характеристикам в рамках единой модели.
- 3) Проведён анализ корреляций между параметрами быстрой и задержанной компонент люминесценции перовскитных нанокристаллов и предложена феноменологическая кинетическая модель, описывающая обнаруженные корреляции.
- 4) Для явления оптического переключения одиночных нанокристаллов перовскитов с избытком свинца при помощи света с энергией кванта ниже ширины запрещённой зоны построена модель одномерной кинетики, основанная на учёте медленной свето-индуцированной временной динамики глубоких ловушек. Продемонстрировано качественное согласие с экспериментально наблюдаемыми закономерностями.

Достоверность и обоснованность представленных результатов подтверждается использованием известного математического аппарата скоростных уравнений. Научные результаты и выводы, представленные в работе, являются обоснованными и логичными и имеют высокую научную ценность. Результаты работы апробированы на различных всероссийских и международных конференциях.

Практическая значимость полученных результатов определяется разработкой новых методов анализа экспериментальных данных в экспериментах по время-коррелированному счёту фотонов, а также возможностью использования построенных теоретических моделей для предсказания и оптимизации характеристик люминесценции одиночных квантовых точек и полупроводниковых нанокристаллов.

Публикации, отражающие содержание диссертации.

По теме диссертации опубликовано 5 печатных работ, из которых 4 в журналах первого квартиля. Публикации полностью отражают результаты диссертации и положения, выносимые на защиту.

Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

Несмотря на общий высокий уровень работы, следует отметить ряд **замечаний**, которые не являются существенными по отношению к результатам работы:

- 1) При описании явления задержанной люминесценции вводится дополнительная экспоненциальная компонента интенсивности с более длинными характерными временами. Не вполне ясно, почему исключается возможность аппроксимации бóльшим числом компонент с различными характерными временами, или (в наиболее общем случае) стрейч-экспоненциальной функцией.
- 2) В разделе 6.5 строятся кинетические уравнения для концентраций носителей заряда с учётом временной динамики глубоких ловушек. При этом никак не пояснён выбор численных значений для вероятности разрушения ловушечных уровней в результате безызлучательной рекомбинации (формула (177)).
- 3) В тексте работы не отражена связь параметров логистической кривой, которая описывает эффект оптического восстановления (формула (130)), с внутренними параметрами модели кинетики носителей заряда, введённой в Главе 6.

Заключение.

Диссертационная работа Э.А. Подшивайлова «Теоретические модели долговременных изменений параметров люминесценции в одиночных полупроводниковых квантовых точках и нанокристаллах» является полностью завершённой исследовательской работой, соответствующей специальности 1.3.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества. Она полностью отвечает требованиям ВАК, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата наук, а её автор **заслуживает** присуждения степени кандидата наук по специальности 1.3.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Доклад по диссертации заслушан на семинаре «Квантовая оптика» ИАиЭ СО РАН 27 ноября 2025г.

Отзыв составил:

старший научный сотрудник

лаборатории 02 ИАиЭ СО РАН

кандидат физико-математических наук



Томилиן Владимир Александрович

Подпись заверяю

Учёный секретарь ИАиЭ СО РАН

Иваненко А.В.



Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт автоматизации и электрометрии СО РАН»

Адрес: 630090, г. Новосибирск, пр. Академика Коптюга, д.1

Телефон: +7 (383) 330-79-69

E-mail: iae@iae.nsk.su