

ВІДГУК ОФІЦІЙНОГО ОПОНЕНТА

на докторську дисертацію **Малика Ореста Петровича** „*Явища переносу в напівпровідниках $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^V$ на основі близькодійючих моделей розсіяння носіїв заряду*”, подану до захисту у Спеціалізованій вченій раді Д 35.051.09 при Львівському національному університеті імені Івана Франка

Докторська дисертація О.П. Малика „Явища переносу в напівпровідниках $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^V$ на основі близькодійючих моделей розсіяння носіїв заряду” складається з анотації (українською і англійською мовами), вступу, п’яти розділів, висновків, списку використаних джерел та одного додатку.

У вступі обґрунтовано актуальність теми дослідження, вказано її зв’язок з науковими програмами, планами і темами, мету та завдання, об’єкт, предмет і методи дослідження, відображено новизну та практичне значення одержаних результатів, особистий внесок здобувача та стан апробації матеріалів, винесених на захист.

Перший розділ дисертації традиційно висвітлює результати аналізу літературних даних щодо сучасних уявлень про явища перенесення в твердих розчинах сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^V$. Розкрито існуючі методи теоретичного дослідження процесів розсіювання носіїв заряду на різного типу дефектах кристалічної ґратки: іонізованих і нейтральних домішках, потенціалі статичної деформації, акустичних і оптичних (поляричних і неполярних) фонах, коливаннях п’єзоелектричного поля. Дано критичну оцінку кожного з них і вказано притаманні їм недоліки.

Наступні розділи містять результати оригінальних досліджень здобувача. Зокрема, у другому розділі здійснено вибір і обґрунтування моделей розсіювання носіїв заряду на дефектах кристалічної ґратки у наближенні взаємодій близькодійючого характеру.

У третьому розділі презентовано розроблений автором дисертації метод розв’язування стаціонарного рівняння Больцмана для напівпровідника з ізотропним законом дисперсії у випадку довільного відхилення функції розподілу від рівноважного значення.

Четвертий розділ присвячений аналізу результатів розрахунків температурних залежностей рухливості електронів у сполуках $Cd_xHg_{1-x}Te$, $Cd_xHg_{1-x}Se$, $Zn_xHg_{1-x}Te$, $Zn_xHg_{1-x}Se$, GaN, ZnO, CdS, InN та InSb, виконаних у рамках розроблених у попередньому розділі методів, а також їх порівняння з експериментальними даними, опублікованими іншими незалежними авторами. Показано, що результати

теоретичних розрахунків добре узгоджуються з експериментом в інтервалі температур від 4,2 К до кімнатної. Встановлено роль кожного з механізмів розсіювання у різних частинах указанного температурного інтервалу для кожної з досліджуваних сполук.

У п'ятому розділі виконані аналогічні розрахунки для важких дірок у сполуках $Cd_xHg_{1-x}Te$, $Zn_xCd_{1-x}Te$ та GaN , які також виявили добре узгодження з експериментальними даними у всьому досліджуваному інтервалі температур.

За результатами досліджень сформульовані висновки, які констатують факт розроблення здобувачем нового підходу до опису явищ перенесення електронів і дірок у кристалах $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^V$, на основі моделей близькодіючого характеру процесів розсіювання носіїв заряду на дефектах кристалічної ґратки різної природи.

Список використаних джерел налічує 331 посилання. У додатку виокремлено список публікацій автора, внесених у дисертацію.

Матеріали дисертаційної роботи в повному обсязі відображені у 82 наукових працях, серед яких 35 статей у провідних фахових журналах та збірниках (у тому числі 16 статей у виданнях, індексованих наукометричними базами даних Scopus і Web of Science, 3 статті в закордонних фахових виданнях, 14 статей у вітчизняних фахових виданнях з переліку ДАК України, 2 статті у наукових збірниках) та у 47 тезах доповідей на міжнародних конференціях.

Автореферат повністю відтворює зміст дисертації.

Актуальність теми

Актуальність обраного автором наукового напрямку обумовлена збереженням протягом уже понад п'ять останніх десятиліть високого рівня уваги до методів отримання бінарних напівпровідникових сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^V$, тонких плівок і нанорозмірних структур різної вимірності на їх основі, а також дослідження їх різноманітних фізичних властивостей. Високий інтерес до таких структур пояснюється тим, що напівпровідники $A^{II}B^{VI}$ й $A^{III}B^V$, а також твердих розчинів на їх основі широко використовуються для створення люмінесцентних і лазерних екранів, приладів мікро-, опто- та наноелектроніки, ІЧ-техніки та сонячних елементів. Легуванням сполук $A^{II}B^{VI}$ й $A^{III}B^V$ домішками перехідних елементів отримано магнітоактивні матеріали для створення магнітних датчиків і різноманітних пристроїв магнітооптики. Протягом 10-15 останніх років суттєво зріс інтерес дослідників до вивчення властивостей систем твердих розчинів названих напівпровідників, легуваних ізовалентними домішками, оскільки істотні зміни ширини забороненої зони при практично незмінних параметрах кристалічної ґратки таких матеріалів обумовлюють широкий діапазон їх застосування для створення

ряду новітніх оптоелектронних пристроїв, зокрема, лазерів, гетероструктурних біполярних транзисторів та сонячних елементів.

Серед можливих застосувань в цивілізаційному вимірі чи не найважливішим є саме створення елементної бази сонячної енергетики. Відомо, що розвиток сучасної цивілізації супроводжується сталим зростаннями енергоспоживання. Зростання народонаселення сприяє прискоренню цього процесу, а скорочення запасів традиційних енергоносіїв і екологічні проблеми з їх видобуванням та використанням, сприяє неухильному зростанню вартості виробництва енергії. За існуючими прогнозами, світовий попит на енергію до 2050 року зросте удвічі, а до кінця XXI століття – більш, ніж у три рази. Ця обставина робить проблему пошуку джерел достатніх запасів чистої енергії однією з найважливіших проблем людства. Одним з її розв'язків є перетворення в електричну енергію сонячного випромінювання.

Дійсно, за одну годину на поверхню Землі потрапляє приблизно $4,3 \cdot 10^{10}$ ГДж сонячної енергії, що відповідає річному обсягу споживання людством енергії у даний час. Разом з тим, частка електроенергії, отриманої перетворенням енергій сонячного випромінювання нині не перевищує 1% обсягу електроенергії, що споживається. Основною причиною цього є висока вартість сонячних батарей і порівняно низька їх ефективність. Отже, до основних завдань у галузі розвитку сонячної енергетики є створення технології масового виробництва високоефективних сонячних елементів. Одним із шляхів у цьому напрямку є створення тонкоплівкових сонячних елементів (СЕ другого покоління). У даний час поширені дві основні технології виготовлення фотоперетворювачів другого покоління: сонячні батареї на основі гідрогенізованого аморфного кремнію або на основі полікристалічного телуриду кадмію чи інших сполук групи $A^{II}B^{VI}$. Ширина забороненої зони CdTe при 300 К становить 1,47 еВ, а коефіцієнт оптичного поглинання при прямих міжзонних переходах в області енергії фотонів понад 1,6 еВ перевищує 4104 см^{-1} , що забезпечує значну густину струму короткого замикання і високий коефіцієнт корисної дії сонячного елемента. Оскільки CdTe – бінарна сполука, то виготовлення легше і дешевше, ніж у випадку багатокomпонентних сполук типу $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$. До того ж CdTe – хімічно стійка і нетоксична сполука.

Визначальними для формування електричних і оптичних властивостей структур, придатних для створення пристроїв сучасної фото-, опто- та радіаційної електроніки є процеси поглинання в оптичному, УФ- та ІЧ-діапазонах або в області випромінювання X-променів, перенесення носіїв заряду та їх розсіювання на фононах чи недосконаlostях кристалічної ґратки. На даний час опубліковано

чимало експериментальних і теоретичних праць, присвячених вивченню властивостей напівпровідникових сполук на основі $A^{II}B^{VI}$ і $A^{III}B^V$. Вагомий внесок у дослідження напівпровідникових сполук на основі $A^{II}B^{VI}$ зроблений вітчизняними науковцями, у тому числі й співробітниками Чернівецького університету або його випускниками, що представляють інші відомі наукові установи. Найвідоміші серед них імена Д.В. Корбутяка, І.В. Блонського, І.М. Раренка, М.В. Гавалешка, Л.А. Косяченка, А.Й. Савчука, В.П. Махнія, М.В. Ткача і С.В. Мельничука, результати дослідження яких, разом з їх учнями і послідовниками, дали змогу сформуванню адекватні уявлення про особливості перебігу процесів в електронній системі сполук на основі $A^{II}B^{VI}$.

Проте, стрімкий розвиток науково-технічного прогресу в галузі сучасного оптоелектронного приладобудування вимагає все більш поглибленого і послідовного теоретичного опису стану електронної системи, який би давав ліпше узгодження результатів теоретичних розрахунків з відомими експериментальними даними. У докторській дисертації О.П. Малика розвинуто методи теоретичного дослідження процесів розсіювання носіїв заряду на дефектах кристалічної ґратки в напівпровідникових сполуках $A^{II}B^{VI}$ і $A^{III}B^V$, а також твердих розчинах на їх основі, що найчастіше використовуються для створення сучасних оптоелектронних та інших пристроїв. Розроблені у ній методи побудовані на основі більш реалістичних, ніж існуючі до цього моделях, що враховують близькодіючий характер взаємодій носія з дефектами, а тому вирішує окреслену вище проблему адекватнішого опису перебігу процесів в електронній системі досліджуваних напівпровідників.

Викладене вище свідчить про актуальність теми, обраної автором даної дисертації.

Зв'язок теми з державними науковими програмами

Дисертація виконана відповідно до планів науково-дослідних робіт кафедри напівпровідникової електроніки Національного університету “Львівська політехніка” за темами: „Явища переносу в напівпровідниках $A^{II}B^{VI}$ ” (номер державної реєстрації 0107U009533); „Фізико-хімічні процеси синтезу і контрольованої модифікації властивостей матеріалів функціональної мікро- та наноелектроніки та розроблення перетворювальних приладів на їх основі” (номер державної реєстрації 0113U001367).

Наукова новизна одержаних результатів

На мою думку, наукова новизна одержаних у дисертації результатів полягає в тому, що її автором вперше:

- 1) запропоновано новий, на основі принципу близькодії, підхід до опису процесів взаємодії носія заряду з точковими дефектами кристалічної ґратки;
- 2) обґрунтовано вибір потенціалів взаємодії носія заряду з нейтральною домішкою та з центром статичної деформації;
- 3) отримано гамільтоніан електрон-фононої (з усіма гілками фононного спектра) взаємодії у представленні вторинного квантування;
- 4) розроблений метод пошуку аналітичного розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана для напівпровідника з ізотропним законом дисперсії та екстремумом енергетичних зон у центрі зони Бриллюена;
- 5) на основі запропонованого підходу розраховані температурні залежності рухливості носіїв заряду в низці напівпровідникових сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^V$ зі структурою сфалериту і вюртциту, які ліпше узгоджуються з експериментом порівняно з моделями далекодіючих взаємодій в наближенні часу релаксації.

Практичне значення одержаних результатів

Одержані автором результати мають практичне значення, яке полягає в тому, що:

- запропонований автором підхід опису процесів розсіювання носіїв заряду на основі принципу близькодії поглиблює уявлення про механізми їх протікання у твердих розчинах $Cd_xHg_{1-x}Te$, $Cd_xHg_{1-x}Se$, $Zn_xCd_{1-x}Te$, $Zn_xHg_{1-x}Se$, $Zn_xHg_{1-x}Te$, $InSb$, GaN , InN , CdS та ZnO і може бути використаний для адекватного моделювання інших, наприклад, оптичних, процесів у цих та створених на їх основі структурах;
- побудовані автором моделі розсіювання носіїв заряду на близькодіючих потенціалах кристалічних дефектів можуть бути використані для обчислення компонент тензора провідності в напівпровідникових сполуках $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^V$ зі структурою сфалериту і вюртциту, що дасть змогу визначити різноманітні електрофізичні характеристики цих матеріалів;
- запропонований метод розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана може бути використаний для визначення нерівноважної функції розподілу напівпровідникових твердих розчинів на основі сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^V$, що мають ізотропний закон дисперсії та екстремуми енергетичних зон у центрі зони Бриллюена;
- результати дисертації можуть бути використані для теоретичного дослідження електричних і оптичних властивостей низьковимірних нанорозмірних гетероструктур на основі напівпровідникових сполук $A^{II}B^{VI}$, $A^{III}B^V$ та їх твердих розчинів.

Ступінь обґрунтованості та достовірності положень, висновків і рекомендацій, сформульованих у дисертації

Дисертація виконана на високому науковому рівні з використанням апробованих традиційних та сучасних методик, адекватних меті та задачам роботи: метод теорії збурень для розв'язування квантово-механічних задач теорії розсіяння, методи математичної фізики для розв'язування рівняння Пуассона та інтегро-диференціального рівняння Больцмана, методи алгебраїчної геометрії для розв'язування системи неоднорідних алгебраїчних рівнянь, метод інтерполяції для визначення залежностей фізичних характеристик твердих розчинів від складу компонентів, метод Ньютона-Котеса для числового інтегрування. Усе це, разом з широким і всебічним оприлюдненням результатів, отриманих у ході виконання дисертації, забезпечує їх достовірність.

Наукові положення і висновки, наведені у дисертації, достатньо обґрунтовані. Вони впливають з мети і змісту роботи, мають велике теоретичне і практичне значення, а завдяки запропонованому автором підходу до вивчення процесів розсіювання носіїв заряду в моделі близькодійних взаємодій з дефектами кристалічної ґратки поглиблює уявлення про механізми реалізації явищ перенесення носіїв у досліджуваних напівпровідникових структурах.

Однак, поряд з безумовно позитивними науковими результатами дисертаційна робота не позбавлена деяких недоліків і незрозумілостей.

1. До недоліків існуючих методів теоретичного дослідження процесів розсіювання носіїв на дефектах кристалічної ґратки автор відносить використання макроскопічного параметра – діелектричної проникності, який, на його думку, не має сенсу в мікроскопічних процесах (див. п.п. 1.2.2). Проте інший макроскопічний параметр – ефективна маса носія – присутній у формулах, за якими визначаються величини, що визначають процеси розсіювання (див., наприклад, (3.27, 28, 37, 86, 177) та ін.). У чому полягає причина такого вибіркового підходу до вибору параметрів матеріалу?

2. Потенціал іонізованої домішки у напівпровіднику визначається кратністю її іонізації Z_i (див. (2.1)). Проте, сполуки $A^{II}B^{VI}$ і $A^{III}B^V$ характеризуються мішаним, йонно-ковалентним типом зв'язку, тому замість параметра Z_i , на мою думку, логічніше було б використовувати ефективний заряд іона Z^* . Урахування ступеня ковалентності зв'язку відповідним підбором параметра теорії γ_{ID} навряд чи можливе, оскільки ймовірність розсіювання на таких домішках (формула (2.9)) визначається другим ступенем заряду домішки та четвертим ступенем параметра γ_{ID} .

3. Потенціал дефекту статичної деформації (2.18) побудований з використанням, на мою думку, грубих наближень. По-перше, важко уявити статичну деформацію кристалічної ґратки, дія якої обмежується розміром її елементарної комірки. По-друге, цей потенціал вважається сферично-симетричним і, водночас, подібним до потенціалу елементарного диполя, оскільки будується на потенціалі диполя (2.17).

4. При розрахунках ймовірностей переходів при розсіянні носія заряду на акустичному фононі (формула (2.80)), неполярному оптичному фононі (формула (2.107)), полярному оптичному фононі (формула (2.168)), п'єзоакустичному (формула (2.224)) та п'єзооптичному фононі (формула (2.234)) обчислення відповідних сум за хвильовим вектором фононів та гілках коливного спектра автор здійснює шляхом інтегрування по сфері, вписаній у першу зону Бріллюена. На мою думку, при цьому втрачається певна кількість фононних (коливних) станів. Чи їх втрата не вплине на точність розрахунків?

5. У вступній частині дисертації (див. п.п. 1.3.1, 2) автор відзначає, що найбільш поширеними наближеними методами розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана є метод часу релаксації та варіаційний метод. Проте, відомий ще один метод опису кінетичних властивостей напівпровідників – метод Монте-Карло (див., наприклад, J. D. Albrecht, R.P. Wang, P.P. Ruden, *et al.*, J. Appl. Phys. (1998)). У зв'язку з цим виникає питання: як співвідносяться результати розрахунків на основі методу, запропонованого автором, з результатами методу Монте-Карло?

6. У текстах дисертації і автореферату здобувачем вживаються, на жаль, не зовсім зрозумілі, або не загальноприйняті терміни та позначення. Наприклад, „точковий диполь” (стор. 91) замість загальноприйнятого „елементарний диполь”; „гамільтоніан у вигляді функції дискретних змінних” (стор. 163) замість загальноприйнятого „гамільтоніан у представленні вторинного квантування”, позначення LO і TO для поздовжньої та поперечних мод акустичних фононів (стор. 106) замість загальноприйнятих позначень LA і TA;

Крім того, в отриманому мною примірнику дисертації містяться деякі орфографічні (наприклад, пропуски літер у словах на стор. 4, 50, 114 та інш.) і стилістичні помилки (наприклад, „... в околиці точки ...” (стор. 46), „... функція розкладається у ряд ...” (стор. 50), „... сумування по індексам ...” (стор. 95) та інші).

Незважаючи на вказані зауваження, в цілому текст дисертації й автореферату написані доброю українською мовою і достатньо повністю висвітлюють зміст дисертації, що являє собою цілісну і завершену наукову працю, в якій отримані нові науково обґрунтовані результати, які в сукупності є значним досягненням для розвитку теорії явищ перенесення носіїв заряду в напівпровідниках, встановлення

механізмів їх розсіювання на різноманітних дефектах кристалічної ґратки та температурних інтервалів, у межах яких кожний з них ефективно впливає процеси перенесення заряду. Зазначені недоліки не применшують цінності наведених у дисертації наукових результатів, а тому й не викликають сумнівів у достовірності сформульованих у ній висновків.

Висновок про відповідність дисертації вимогам, які пред'являються до наукового ступеня доктора фізико-математичних наук

Дисертація Малика Ореста Петровича „Явища переносу в напівпровідниках $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^V$ на основі близькодіючих моделей розсіяння носіїв заряду” виконана у Національному університеті „Львівська політехніка” є завершеною науковою працею, в галузі фізики напівпровідників, в якій в отримані нові науково обґрунтовані теоретичні результати, що в сукупності є значним досягненням для вирішення важливої наукової проблеми – розвитку послідовної теорії явищ перенесення носіїв заряду в напівпровідниках. За своєю актуальністю, науковою новизною, практичним значенням отриманих результатів, обґрунтованістю основних положень і висновків названа дисертація повністю відповідає вимогам п. 10 Порядку присудження наукових ступенів, затвердженого постановою КМУ № 567 від 24.07.2013 зі змінами відповідно до постанови КМУ № 656 від 19.08.2015 і наказу МОНУ №40 від 12.01.2017, а її автор – Малик Орест Петрович – заслугоує присудження йому наукового ступеня доктора фізико-математичних наук із спеціальності 01.04.10 – фізика напівпровідників і діелектриків.

Офіційний опонент,
завідувач кафедри професійної
та технологічної освіти і загальної фізики
Чернівецького національного університету
імені Юрія Федьковича,
доктор фізико-математичних наук, професор

Крамар В.М.

