Відгук
офіційного опонента про дисертаційну роботу
Малика Ореста Петровича

“Явища переносу в напівпровідниках $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$ на основі близькодіючих моделей розсіяння носіїв заряду”

подану на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.10 – фізика напівпровідників і діелектриків

Дисертаційна роботі Малика О.П. присвячена розробленню на основі принципу близькодії нового підходу для опису процесів розсіяння носіїв заряду на кристалічних дефектах різного типу в низці напівпровідникових сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$ з використанням точного розв’язку стаціонарного рівняння Больцмана для напівпровідника з ізотропним законом дисперсії. Матеріали, які досліджуються у дисертації, є типовими напівпровідниками, що свідчить про відповідність досліджень обраній спеціальності (фізика напівпровідників і діелектриків). Моделювання механізмів фізичних процесів розсіяння носіїв заряду на точкових дефектах кристалічної гратки, яке розглядається у запропонованій дисертаційній роботі, безумовно свідчить про відповідність роботи фізико-математичним наукам.

На теперішній час для опису явищ перенесення в сполуках $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$ застосовується наближення часу релаксації або варіаційний метод. В основі цих двох методів лежить застосування квантово-механічних далекодіючих моделей розсіяння носіїв заряду на різного типу дефектах кристалічної гратки. Однак, як показує практика, такі моделі не завжди дають добре якісне та кількісне узгодження теорії та експерименту. Тому виникає потреба такого подальшого розвитку цих методів опису явищ перенесення в напівпровідниках $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$, які б давали точніший опис характеристик цих сполук. *Особливістю даної роботи є таке узагальнення та розвиток зазначених вище підходів у теорії розсіяння носіїв заряду на дефектах кристалічної гратки, які дають ліпше узгодження експериментальних даних з теоретичними розрахунками.* У роботі наведено результати досліджень автора по розробленню близькодіючих моделей розсіяння носіїв заряду на точкових дефектах напівпровідникових кристалів зі структурою цинкової обманки та вюртциту.

Мета дисертаційної роботи полягає в створенні на основі принципу близькодії нового підходу для опису процесів розсіяння електронів та дірок на кристалічних дефектах різного типу в низці напівпровідникових сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$ з використанням точного розв’язку стаціонарного рівняння Больцмана для напівпровідника з ізотропним законом дисперсії. Виходячи із цього роботу можна віднести до таких, які вирішують задачі, що знаходиться на передньому краї наукових проблем сьогодення фізики напівпровідників.

Для досягнення мети роботи було ***поставлено і вирішено*** наступні

основні ***завдання***:

1. Вибір близькодіючого потенціалу розсіяння носіїв заряду на різного типу дефектах кристалічної гратки зі структурою сфалериту та вюртциту.
2. Розв'язок квантово-механічної задачі розсіяння носія заряду на близькодіючому потенціалі, викликаному взаємодією носія заряду з полярними оптичними фононами, неполярними оптичними фононами, акустичними фононами, акустичними й оптичними коливаннями п'єзоелектричного поля, зарядженою домішкою, нейтральною домішкою та потенціалом статичної деформації.
3. Розв'язок стаціонарного рівняння Больцмана для напівпровідника з ізотропним законом дисперсії та визначення критерію відбору фізичних розв'язків серед сукупності математичних розв'язків.
4. Порівняння теоретичних кривих, отриманих у рамках близькодіючих та далекодіючих моделей розсіяння, з експериментальними даними для температурних залежностей рухливості носіїв заряду в твердих розчинах $Cd_xHg_{1-x}Te$, $Cd_xHg_{1-x}Se$, $Zn_xCd_{1-x}Te$, $Zn_xHg_{1-x}Te$, $Zn_xHg_{1-x}Se$, InSb (структура сфалериту) та в сполуках GaN, InN, CdS та ZnO (структура вюртциту).

З моєї точки зору об'єкт і предмет дослідження сформульовані вірно. Тобто:

Об'єкт дослідження – квантово-механічні процеси розсіяння носія заряду на різного типу дефектах кристалічної гратки в низці сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$.

Предмет досліджень – явища перенесення в низці сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$, розглянутих на основі близькодіючих моделей розсіяння носія заряду на різного типу дефектах кристалічної гратки.

В ході розв'язку вище сформульованих завдань були використані добре апробовані математичні методи досліджень, зокрема: 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. Застосування цих відомих математичних прийомів є підтвердженням **достовірності отриманих результатів**.

В результаті проведених досліджень були отримані наступні **нові наукові результати:**

1. На основі принципу близькодії розвинуто новий підхід до опису процесу взаємодії носія заряду з точковими дефектами кристалічної гратки. Зроблено припущення, що потенціал розсіяння діє тільки в межах однієї елементарної комірки.

2. Показано, врахування близькодії при розсіянні носія заряду на іонізованій домішці вводить обмеження на характерний радіус кулонівської

взаємодії розмірами кристалічної комірки a_0, тобто, допускає представлення $r = \gamma_{ІД} a_0$, де підгінний параметр $\gamma_{ІД}$ змінюється в межах [0,1]. В цьому випадку ймовірність розсіювання носія заряду на іонізованій домішці у $\boldsymbol{k}$-просторі в наближенні ефективної маси демонструє сильну степеневу залежність від $\gamma_{ІД}$ (~ $\gamma_{ІД}^4$), що різко обмежує можливість вибору його чисельного значення.

3. Встановлено, що врахування у кристалі принципу близькодії при розсіянні носія заряду на нейтральній домішці можливе при обмеженні характерного радіусу їх взаємодії половиною сталої гратки. Показано, що моделювання такої взаємодії в рамках моделі Ерджинсоя дозволяє отримати перенормований вираз для ймовірності розсіяння носія заряду на потенціалі нейтральної домішки, що суттєво (у ~ 5 разів) завищує ефективний радіус Бора.

4. Показано, що моделювання на основі принципу близькодії процесу взаємодії носія заряду з центром статичної деформації може бути виконано видозміною потенціалу взаємодії $U \sim b_0 r^{-2}$ (b_0 – величина, яка зв'язана з розміром дефекту). Зроблено припущення, що величина b_0 рівна постійній решітки, тобто, сферично-симетричне поле центру статичної деформації діє тільки в межах однієї елементарної комірки. Це дозволило в рамках наближення ефективної маси визначити вираз для ймовірності переходу носія заряду з стану $\boldsymbol{k}$ в стан $\boldsymbol{k}'$ під час розсіяння на близькодіючому потенціалі центру статичної деформації.

5. Встановлено, що врахування принципу близькодії в описі взаємодії носія заряду з акустичним фононом в кристалі зумовлює необхідність вибору вихідного гамільтоніана взаємодії у вигляді функції дискретних змінних. З врахуванням дискретності кристалічної решітки розроблено методику розрахунку компонентів тензора деформації. Представлено обчислення величин ефективного акустичного потенціалу деформації $E_{АК}$ для електронів та дірок. Розроблено методику інтегрування за величиною хвильового вектора фонона в межах зони Бриллюена, що дозволило розрахувати ймовірності переходу носія заряду з стану $\boldsymbol{k}$ в стан $\boldsymbol{k}'$ під час розсіяння на близькодіючому потенціалі акустичного фонона з врахуванням пружного характеру розсіяння.

6. У ході розгляду процесу розсіянні носія заряду (електрон або дірка) на неполярному оптичному фононі в рамках принципу близькодії зроблено вибір гамільтоніана взаємодії у вигляді функції, залежної від дискретних змінних. В наближенні ефективної маси здійснено обчислення величин ефективного оптичного потенціалу деформації $E_{НПО}$ для електронів та дірок. Обґрунтовано методику інтегрування за величиною хвильового вектора фонона в межах зони Бриллюена, що дозволило розрахувати ймовірності переходу носія заряду з стану $\boldsymbol{k}$ в стан $\boldsymbol{k}'$ під час розсіяння на близькодіючому потенціалі неполярного

оптичного фонона, де враховано непружний характер розсіяння та розсіяння з переворотом спіна.

7. Показано, що врахування близькодії під час взаємодії електрона (дірки) з полярним оптичним фононом визначає вибір дипольного моменту та вектора поляризації елементарної комірки у вигляді функції дискретних змінних. Розроблено методику розрахунку об'ємної густини зв'язаного заряду, що відповідає вектору поляризації елементарної комірки. Представлено метод розв'язання рівняння Пуассона для потенціалу зв'язаного заряду, що включає заміну елементарної комірки сферою з ефективним радіусом, який визначає радіус дій потенціалу взаємодії $R=\gamma_{ПО}\ a_0$ $(0<\gamma_{ПО}\leq\sqrt{3}/2)$. Для обчислення матричного елементу переходу носія заряду з стану $\boldsymbol{k}$ в стан $\boldsymbol{k}'$ розроблено: а) спосіб інтегрування за координатами електрона та проведено оцінку отриманого виразу для хвильового вектора носія заряду $\boldsymbol{k}$ в межах $0 \div 10^9\ м^{-1}$; б) спосіб інтегрування за хвильовим вектором фонона та проведено оцінку отриманого виразу в межах дії потенціалу взаємодії ($\sim 10^{-10}\ м$). Визначено вираз для ймовірності переходу носія заряду при розсіяння на близькодіючому потенціалі полярного оптичного фонона, де враховано непружний характер розсіяння. Встановлено, що ймовірність переходу при даному типі взаємодії демонструє сильну степеневу залежність від підгінного параметра $\gamma_{ПО}$ ($\sim\gamma_{ПО}^{10}$), що різко обмежує можливість вибору його чисельного значення.

8. Встановлено, що врахування принципу близькодії в разі описі процесу розсіяння носія заряду на акустичних та оптичних коливаннях п'єзоелектричного поля визначає вид виразу для макроскопічного вектора поляризації, що виражається через компоненти тензора деформації та п'єзоелектричного тензора, та є функцією дискретних змінних. Представлено методику розрахунку об'ємної густини зв'язаного заряду, який відповідає макроскопічному вектору поляризації. Запропоновано метод розв'язання рівняння Пуассона для потенціалу зв'язаного заряду, що включає заміну елементарної комірки сферою з ефективним радіусом, який визначає радіус дій потенціалу взаємодії $R=\gamma_{ПЕ}\ a_0$ $(0<\gamma_{ПЕ}\leq\sqrt{3}/2)$. В рамках наближення ефективної маси представлено: а) спосіб інтегрування за координатами електрона та проведено оцінку отриманого виразу для хвильовий вектор носія заряду $\boldsymbol{k}$ в межах $0 \div 10^9\ м^{-1}$; б) спосіб інтегрування за хвильовим вектором фонона та проведено оцінку отриманого виразу в межах дії потенціалу взаємодії ($\sim 10^{-10}\ м$). Визначено вираз для ймовірності переходу носія заряду під час розсіяння на близькодіючому потенціалі акустичних коливань п'єзоелектричного поля з врахуванням пружного характеру розсіяння, а також вираз для ймовірності переходу носія заряду при розсіяння на близькодіючому потенціалі оптичних коливань п'єзоелектричного поля, де враховано непружний характер розсіяння Встановлено, що ймовірність переходу при даних типах взаємодії демонструє сильну степеневу залежність від

підгоночного параметра $\gamma_{ПЕ}$ ($\sim\gamma_{ПЕ}^{10}$), що різко обмежує можливість вибору його чисельного значення.

9. Запропоновано метод знаходження аналітичних розв'язків стаціонарного рівняння Больцмана для напівпровідника з ізотропним законом дисперсії, який є правильний для довільного відхилення функції розподілу від рівноважного значення. Визначено критерій відбору фізичних розв'язків серед сукупності математичних розв'язків стаціонарного рівняння Больцмана. Представлена методика розрахунку множників $K_{\beta\alpha a}^{nm}$ при коефіцієнтах розкладу в ряд за степенями енергії нерівноважної функції розподілу для різних механізмів розсіяння.

10. На основі запропонованого підходу наведено теоретичні температурні залежності рухливості носіїв заряду в низці напівпровідникових сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$ зі структурою сфалерит та вюртцит, які якісно та кількісно краще узгоджуються з експериментом порівняно з далекодіючими моделями в наближенні часу релаксації.

Практичне значення одержаних результатів полягає в наступному:

1. Запропонований підхід розгляду процесів розсіяння носіїв заряду на основі принципу близькодії 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 поглиблює наші знання з напівпровідникового матеріалознавства і може бути використаний для моделювання фізичних процесів, що відбуваються у створюваних на їхній основі приладах.

2. Розглянуті моделі розсіяння носіїв заряду на близькодіючих потенціалах кристалічних дефектів дають змогу обчислити компоненти тензора провідності в напівпровідникових сполуках $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$ зі структурою сфалерит та вюртцит, що допоможе визначити різноманітні електрофізичні характеристики цих напівпровідників.

3. Розглянутий 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

Особистий внесок здобувача у результати представленої дисертаційної роботи є визначальним, про що свідчить велика кількість статей, написаних автором самостійно. Основні результати дисертаційної роботи опубліковано у 82 наукових працях. Серед них 35 статей у реферованих фахових журналах і збірниках та 47 тез доповідей на міжнародних конференціях.

Структура дисертації. Дисертація складається зі вступу, п'ятьох розділів, загальних висновків, переліку літературних посилань (331 посилання) і додатка, 94 рисунків та 22 таблиц. Загальний обсяг – 371 сторінка.

У розділі 1 "Сучасні уявлення про явища перенесення в сполуках $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$" описано далекодіючі моделі процесів розсіяння носіїв заряду на різного типу дефектах кристалічної гратки, а також розглянуто два основні наближені методи розв'язування стаціонарного кінетичного рівняння Больцмана - наближення часу релаксації та варіаційного методу. Вказано на існуючі недоліки, що лежать в основі далекодіючих моделей розсіяння, а також підкреслено наближений характер двох вищезазначених методів розв'язування рівняння Больцмана.

У розділі 2 "Близькодіючі моделі розсіяння носіїв заряду на дефектах кристалічної решітки сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$" представлено послідовне розроблення моделей розсіяння носіїв заряду на близькодіючому потенціалі дефектів кристалічної гратки.

У розділі 3 "Розв'язок стаціонарного рівняння Больцмана для напівпровідника з ізотропним законом дисперсії" наведено метод розв'язування стаціонарного рівняння Больцмана для напівпровідника з ізотропним законом дисперсії у випадку довільного відхилення функції розподілу від рівноважного значення.

У розділі 4 "Застосування принципу близькодії до опису процесів розсіяння електронів в твердих розчинах сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$" проведено порівняння теоретичних кривих та експериментальних даних для температурних залежностей рухливості електронів у сполуках $Cd_xHg_{1-x}Te$ ($0\le x\le 1$), $Cd_xHg_{1-x}Se$ ($0\le x\le 0.547$), $Zn_xHg_{1-x}Te$ ($x=0.15$), $Zn_xHg_{1-x}Se$ ($0.02 \le x \le 1$), GaN, ZnO, CdS, InN, InSb.

У розділі 5 "Розсіяння важких дірок на близькодіючому потенціалі кристалічних дефектів в сполуках $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$" виконано порівняння теоретичних кривих та експериментальних даних для температурних залежностей рухливості дірок у сполуках $Cd_xHg_{1-x}Te$ ($0\le x\le 1$), $Zn_xCd_{1-x}Te$ ($0\le x\le 1$) та GaN.

Таким чином у дисертації:

Обґрунтовано застосування принципу близькодії при розгляді взаємодії носія заряду з дефектами кристалічної гратки. На базі цього принципу розроблено близькодіючі моделі розсіювання носіїв заряду на точкових дефектах кристалу. На основі точного розв'язку кінетичного рівняння здійснено опис транспортних властивостей низки напівпровідникових сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$. Показано, що отримані теоретичні кінетичні характеристики сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$ дають набагато краще якісне і кількісне узгодження з експериментальними даними в порівнянні з аналогічними характеристиками, розрахованими на основі далекодіючих моделей (наближення часу релаксації).

Отримані результати започатковують **новий підхід до розгляду кінетичних властивостей напівпровідникових сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$** – опис транс-портних явищ у зазначених сполуках на основі принципу близькодії.

До найбільш важливих наукових результатів дисертаційної роботи хотів би віднести наступне:

- Послідовно розвинуто близькодіючі моделі розсіяння носіїв заряду на восьми типах точкових кристалічних дефектів: 1) іонізована домішка; 2) нейтральна домішка; 3) центр статичної деформації; 4) акустичні коливання кристалічної гратки; 5) неполярні оптичні коливання кристалічної гратки; 6) полярні оптичні коливання кристалічної гратки; 7) акустичні коливання п'єзоелектричного поля кристалічної гратки; 8) оптичні коливання п'єзоелектричного поля кристалічної гратки.
- Запропоновані близькодіючі моделі розсіяння не містять суперечностей, що лежать у вихідних положеннях далекодіючих моделей.
- Запропоновано метод знаходження аналітичних розв'язків стаціонарного рівняння Больцмана для напівпровідника з ізотропним законом дисперсії, який правильний для довільного відхилення функції розподілу від рівноважного значення.
- Визначено критерій відбору фізичних розв'язків серед сукупності математичних розв'язків стаціонарного рівняння Больцмана.
- Встановлено, що близькодіючі моделі більш адекватно описують процеси розсіяння носіїв заряду на точкових дефектах кристалу в порівнянні з аналогічними далекодіючими моделями.

На завершення слід зробити деякі зауваження та поставити запитання, які виникають при ознайомленні з матеріалами дисертаційної роботи. Зокрема:

1. При розгляді розсіяння на іонізованій і нейтральній домішці, центрі статичної деформації, полярному оптичному фононі, п'єзоелектричному фононі (формули (2-1),(2-10),(2-17),(2-159),(2-179), відповідно) , при розв'язуванні рівняння Пуассона (формули (2-150),(2-212)) автор приймає, що діелектрична проникність (макроскопічний параметр) кристалу $\kappa = 1$. З іншого боку, у виразах для ймовірностей переходу при розсіяння на центрі статичної деформації, п'єзоакустичному та п'єзооптичному фононі (формули (2-1), (2-10),(2-17),(2-159),(2-179), відповідно) автор використовує теж макроскопічний параметр – e_{14}(компонента п'єзоелектричного тензора). Тут спостерігається певна непослідовність автора у виборі гамільтоніана взаємодії: в одному випадку макроскопічний параметр використовується, а в іншому – ні. Хотілося б почути відповідь автора про причини такого підходу.

2. Згідно результатів дисертаційної роботи за низьких температур у всіх досліджених напівпровідникових сполуках домінуючу роль відіграє розсіяння на центрах статичної деформації. Тут основна характеристика, що визначає інтенсивність розсіяння, є концентрація центрів статичної деформації $N_{СД}$. В ди-

сертаційній роботі величина $N_{СД}$ є підгінним параметром. Виникає питання, які існують фізичні міркування при виборі чисельного значення величини $N_{СД}$?

3. Для отримання виразів ймовірності переходу при розсіянні електронів та дірок на полярному оптичному, п'єзоакустичному та п'єзооптичному фононах необхідно розв'язати рівняння Пуассона для потенціалу електричного поля зв'язаних зарядів (формули (2-150) та (2-212)). Для розв'язку цього рівняння автор використовує наступне спрощення – заміняє елементарну комірку сферою з деяким ефективним радіусом, який виражається через підгінний параметр. Однак, відомо, що елементарна комірка в структурі сфалериту та вюртциту має вигляд складного багатогранника. Питання: 1) наскільки коректна є така заміна? 2) чи відомий розв'язок рівняння Пуассона для елементарної комірки сфалериту та вюртциту?

4. При отриманні виразів для ймовірностей переходу при розсіянні носіїв заряду автор при розрахунку матричного елемента, спираючись на принцип близькодії, проводить інтегрування по об'єму елементарної комірки. При цьому за рахунок використанні деяких спрощень для виду потенціалу взаємодії (сферична симетрія) виникають низка підгінних параметрів ($\gamma_{ПО}$, $\gamma_{ПЕ}$, $\gamma_{ІД}$). Наявність підгінних параметрів завжди приводить до певної неоднозначності теоретичних кривих. Що може сказати автор про точність отриманих теоретичних залежностей $\mu(T)$? На жаль, в дисертації це питання не обговорюється.

5. При порівнянні близькодіючих і далекодіючих моделей розсіювання автор використовує теоретичні температурні залежності рухливості носія заряду, розраховані двома способами. Чи були спроби розрахувати інші кінетичні властивості напівпровідників ? В дисертації представлено такі дані (залежність термо - е.р.с. від температури) лише для антимоніду індію. Чи проводив автор аналогічні розрахунки для інших дев'яти напівпровідникових сполук ?

6. В дисертаційній роботі зустрічаються стилістичні помилки, наприклад:
– вираз "підгоночний параметр" (дивись с.с. 3, 86, 132, 151, 201) необхідно замінити на "підгінний параметр";
– вираз "при низьких температурах" (дивись с.с. 53, 54, 245, 246, 255, 261, 268, 273, 313) необхідно замінити на "за високих температур";
– вираз "справедливий для довільного відхилення функції розподілу" (дивись с.с. 6, 166, 235) необхідно замінити на " правильний для довільного відхилення функції розподілу ".

Зазначені зауваження не є принциповими і не знижують наукову та практичну цінність результатів і висновків дисертаційної роботи. Зміст автореферату відповідає змісту дисертації.

Дисертація Малика Ореста Петровича є закінченим науковим дослідженням, у якому вирішено актуальну наукову проблему – розроблення на

основі принципу близькодії нового підходу до опису процесу взаємодії носія заряду з точковими дефектами кристалічної гратки.

За отриманими результатами та рівнем досліджень ця робота відповідає спеціальності 01.04.10 – фізика напівпровідників і діелектриків. Сукупність досліджень, що наведені в дисертації Малика Ореста Петровича, значимість отриманих результатів, їх достовірність і актуальність переконують в тому, дисертація відповідає вимогам до докторських дисертацій з фізико-математичних наук, а автор заслуговує присудження йому наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.10 – фізика напівпровідників і діелектриків.

Завідувач лабораторії фізичних основ
електронних напівпровідникових
мікро- та нанотехнологій
Інституту фізики напівпровідників
ім. В.Є. Лашкарьова НАН України Євтух А. А.
доктор фізико-математичних наук, професор

Підпис д. ф.-м. н. проф., Євтуха А.А. засвідчую
Вчений секретар
Інституту фізики напівпровідників
ім. В.Є. Лашкарьова НАН України
доктор хімічних наук, професор Томашик В.М.

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ НАПІВПРОВІДНИКІВ ім. В.Є. ЛАШКАРЬОВА
Ідентифікаційний код 05416952
м. КИЇВ