

ВІДГУК

офіційного опонента на 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», представлену на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.10 – Фізика напівпровідників і діелектриків. 01. Фізико-математичні науки.

Актуальність теми

Відомо про складність інтерпретації явищ переносу у складних напівпровідниках із різним складом та співвідношенням хімічних компонент, просторової симетрії розташування атомів, а також складом та концентрації легуючої домішки. Теоретичні методи, запропоновані для їх описання ще в 2-й половині минулого століття базуються на елементарних процесах взаємодії носіїв струму із точковими та просторовими дефектами, фононами поля коливань решітки кристалу і дають адекватне пояснення цих явищ для елементарних напівпровідників як Si та Ge. Проте часто вони не можуть бути застосовані для описання даних електрофізичних, оптичних експериментів для багатокомпонентних напівпровідників, чи їх твердих розчинів, що мають різний тип та ступінь іонності хімічного зв'язку, чи навіть характер структурного розвпорядкування. Тому теорія напівпровідників завжди має потребу у нових ідеях, підходах та методах, вірогідність яких перевіряється при інтерпретації наявних масивів експериментальних даних.

Сказане в повній мірі стосується напівпровідникових сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^V$, які складають значний сегмент матеріалів сучасної опто- та мікроелектроніки, зокрема, апаратури ІЧ-оптики, генераторів та детекторів в широкому діапазоні електромагнітного спектру. Проте, експерименти останніх років, зокрема, по дослідженні температурних залежностей рухливості носіїв заряду в твердих розчинах $Cd_xHg_{1-x}Te$, $Cd_xHg_{1-x}Se$, $Zn_xCd_{1-x}Te$, $Zn_xHg_{1-x}Te$, $Zn_xHg_{1-x}Se$ (структура сфалериту) та в сполуках GaN та ZnO (структура вюртциту) показали їх нетипову поведінку, що не може бути пояснена в рамках традиційних теоретичних підходів. Основою останніх є принцип далекодії, що обумовлений нелокальним характером кулонівської взаємодії носіїв заряду із сукупністю розсіюючих центрів матриці речовини: заряджених, нейтральних домішок, коливань решітки, тощо. Привабливим є дослідити наслідки відмови від принципу далеко дії, та вивчити можливості нових моделей розсіяння носіїв заряду на близькодійючих потенціалах кристалічних дефектів.

Дисертаційна робота Малика О. П. якраз присвячена розробці моделей розсіяння носія заряду використовуючи альтернативу принципу далекодії. Його розрахунки базуються на близькодійючих потенціалах запропонованих ним для полярних та неполярних оптичних фононах, акустичних фононах,

акустичних та оптичних коливаннях п'єзоелектричного поля, зарядженої та нейтральної домішки, потенціалу статичної деформації у твердих розчинах. Враховуючи, що запропонований ним метод дозволив інтерпретувати ряд експериментів, проведених на напівпровідниках сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^V$ та запропонувати нові теоретичні можливості для їх описання можна говорити про *актуальність* вибраної теми досліджень.

Ступінь обґрунтованості наукових положень, висновків і рекомендацій, сформульованих в дисертації

Приведені в дисертації Малика О.П. наукові положення, висновки і рекомендації базуються на результатах тривалих (з 2002-х року) досліджень явищ переносу в умовах дії різних розсіюючих центрів та вивченні хіміко-структурних особливостей, енергетичної структури сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^V$. Дисертант в досконалому володіє традиційними методиками описання процесів розсіювання носіїв заряду як на точкових (іонізованих, нейтральних), так і просторових дефектах та коливаннях ґратки. За звичай, такі дослідження проводяться у наближенні часу релаксації або варіаційним методом на основі далеко діючих моделей. Для відповіді на питання про фізичні наслідки локалізації таких взаємодій дисертанту потрібно було запропонувати власну модель близькодії та переписати на її основі всі елементарні потенціали розсіювання носіїв заряду. Обґрунтуванням такої можливості, як слідує із дисертації є припущення про обмеження області кристалу однією елементарною коміркою, де відбувається взаємодія носія заряду із дефектом. Іншою особливістю роботи є відмова використання діелектричної проникності як макроскопічного параметра, який лише умовно може бути застосований для описання мікроскопічних процесів. Локальність елементарних процесів взаємодії, по задуму дисертанта є альтернативою використання для такого роду явищ макроскопічних представлень про поляризаційні характеристики кристалів як макросубстанції.

Дисертант вказує також про наявність математичної некоректності характерної для далеко діючих теорій при описанні явищ розсіювання в рамках першого наближення теорії збурень. Принцип близькодії дозволяє узгодити використання такого наближення.

Запропоновані Маликом О.П. обмеження на характерний радіус r кулонівської взаємодії електрона провідності із іонізованою домішкою розмірами кристалічної комірки та представлення його у вигляді $r = \gamma_{\text{ЦД}} a_0$ базується на можливості описання, наприклад, температурної залежності рухливості для ряду матеріалів, що неможливо при традиційних підходах. Цей же аргумент, згідно дисертації, справедливий для обмеження r лише половиною сталої ґратки у випадку взаємодії носія заряду із нейтральною домішкою. А також при описанні взаємодії із центром статичної деформації, яка моделюється сферично-симетричним полем, що діє лише в межах елементарної комірки.

Висновок про можливість застосування дискретних змінних (пов'язаних із координатами елементарних комірок структурної сітки кристалу) з одного боку є логічним наслідком запропонованого дисертантом принципу близькодії, з іншого – спробою вийти за рамки представлень про речовину як однорідну субстанцію. Заміна частинних похідних компонент вектора поляризації через прирости функцій в елементарній комірці дозволяє дисертанту отримати чисельні дані щодо спостережуваних величин для їх порівняння із експериментом.

І, нарешті, дисертантом застосовується комплексне порівняння отриманих результатів щодо температурних залежностей рухливості носіїв заряду в твердих розчинах $Cd_xHg_{1-x}Te$, $Cd_xHg_{1-x}Se$, $Zn_xCd_{1-x}Te$, $Zn_xHg_{1-x}Te$, $Zn_xHg_{1-x}Se$ (структура сфалериту) та в сполуках GaN та ZnO (структура вюртциту) отриманих як на експерименті, так і при розрахунках, виконаних в припущенні принципів далекодії та близькодії. В останньому разі, як показано в роботі має місце ліпше узгодження із експериментом.

Достовірність і новизна

В дисертаційній роботі Малик О.П. вперше систематично здійснено переформатування всієї теорії явищ переносу в напівпровідниках із використанням принципу близькодії. І хоч такий перехід здійснено формально за допомогою підгонюваних параметрів, що обмежують потенціали елементарних взаємодій розмірами кристалічної комірки, ігноруючи їх фізичне пояснення – отримані в результаті розрахунків спостережувані кінетичні параметри демонструють добре узгодження із експериментом. Це є без сумніву новим і цікавим для теорії напівпровідників та діелектриків.

Достовірність результатів роботи забезпечена дисертантом глибоким розумінням класики теорії розсіювання носіїв струму на різноманітних центрах (у дисертації їх розглянуто аж 8!) та використанням апробованих теоретичних методів від теорії збурень для розв'язку квантово-механічних задач теорії розсіяння, методів математичної фізики - розв'язку рівняння Пуассона та рівняння Больцмана, методів алгебраїчної геометрії для розв'язку системи неоднорідних алгебраїчних рівнянь, методами інтерполяції для визначення залежностей фізичних характеристик твердих розчинів від складу компонентів до методів Ньютона-Котеса для чисельного інтегрування.

Вдалим є поєднання Маликом О.П. аналітичних та чисельних методів на кожному із етапів дослідження взаємодії носіїв струму із різного роду розсіюючими центрами. Це дало можливість підібрати оптимальний набір параметрів теорії для узгодження теоретичних та експериментальних даних. Більш того, такі дані, приведені в розділі 5 дозволили Малику О.П. зробити висновки щодо домінування різних механізмів розсіювання в залежності від хімічного складу, ступеню легування/розвпорядкування кристалу та температурного інтервалу, в якому проводився експеримент.

Зазначу важливість виконання дисертантом всього циклу досліджень елементарних процесів розсіювання – від встановлення розподілу зв'язаного заряду та потенціалу розсіюючого центру (Розділ 2) шляхом розв'язання рівняння Пуасона (новизна – у методиці розрахунків частинних похідних) та чисельного інтегрування самого рівняння до розрахунків матричних елементів розсіювання носіїв заряду. В останньому випадку запропоновано новий спосіб інтегрування по координатах електрона та враховано зміну його хвильового вектору носія заряду k в межах $0 \div 10^9 \text{ м}^{-1}$, а також інтегрування по хвильовому вектору фонона та проведення оцінки отриманих даних в межах дії потенціалу взаємодії ($\sim 10^{10} \text{ м}$).

Основні результати роботи опубліковано у 70 наукових працях із яких - 30 статей у провідних фахових журналах та збірниках матеріалів конференцій (з них 23 – одноосібні) та 40 тезах доповідей на міжнародних конференціях (всі доповіді одноосібні). Об'єм та якість наукових видань, забезпечує повноту викладу матеріалу дисертації.

Вважаю, що оригінальність та наукова новизна результатів роботи Малика О.П. полягає у:

- Повному переформатуванні традиційної теорії явищ переносу носіїв струму у напівпровідниках та діелектриках на основі принципу близькодії. Дослідження особливості процесів розсіювання в припущенні локальності електричних взаємодій для збурень різної природи – від точкових/протяжних дефектів структури до коливань ґратки;
- Комплексності досліджень, коли запропонована теорія близькодії дозволяє встановити розподіл зв'язаного заряду та потенціал розсіюючого центру, розрахувати функцію розподілу для довільних відхилень від рівноважного стану, а також отримати чисельні дані для спостережуваних величин із врахування кристалічної будови та симетрії (вюртцит, сфалерит) кристалів $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$, $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Se}$, $\text{Zn}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$, $\text{Zn}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Se}$, $\text{Zn}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ і GaN та ZnO;
- Інтерпретації даних наявних електрофізичних експериментів для сполук $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$ та $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$, які не можна було пояснити в рамках традиційних подій, що використовують принцип далеко дії.
- Висновків про роль та домінування різних механізмів розсіювання для досліджуваних матеріалів, які є основою сучасної опто- (включно із ІЧ-діапазоном) та мікроелектроніки.

Практична значимість роботи для фізика напівпровідників та діелектриків полягає у створенні теоретичних основ методик моделювання фізичних процесів переносу в матеріалах $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$, $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ та приладах на їх основі. Як відзначено в дисертації, її результати можуть бути використані для

визначення електрофізичних характеристик вказаних напівпровідникових твердих розчинів.

Представлена дисертація має завершений характер, вона складається з 5-ти розділів, кожний з яких закінчується висновками, що синтезують їх результати. У *першому розділі* зроблено огляд робіт про кристалічну та зонну структуру сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^V$, а також основ традиційного підходу теорії розсіювання носіїв заряду (8 типів розсіюючих центрів!) у таких матеріалах. Детально розглянуто два основних наближених методи розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана - наближення часу релаксації та варіаційного методу. В цьому ж розділі приводяться аргументи в користь принципу далекодії як альтернативу традиційних теоретичних підходів. *Розділ 2* присвячений переформатуванню традиційної теорії розсіювання на основі принципу близькодії. В ньому дисертант аналізує особливості явищ переносу заряду в припущенні локальності електричних взаємодій для збурень різної природи - від точкових/протяжних дефектів структури до коливань ґратки. *Розділ 3* містить описання розв'язків стаціонарного рівняння Больцмана для напівпровідника із ізотропним законом дисперсії для тих же механізмів розсіювання, що і вище, але також в рамках електричної близькодії носіїв струму та дефектів кристалу. У якості досягнень теорії відзначено метод знаходження аналітичних розв'язків стаціонарного рівняння Больцмана для довільного відхилення функції розподілу від рівноважного значення. Наступні розділи присвячені співставленні теоретичних та експериментальних результатів, отриманих, відповідно для електронів (*Розділ 4*) та важких дірок (*Розділ 5*) для цілого ряду сполук $A^{II}B^{VI}$, $A^{III}B^V$. Такий аналіз проведено із детальним врахуванням хіміко-структурних параметрів цих матеріалів та умов експериментів. Результати, отримані в припущенні локальності взаємодії співставлені із такими, отриманими для далеко діючих моделей. На прикладі наявних даних про температурні залежності рухливості дисертант співставляє та аналізує внески різних механізмів розсіювання носіїв заряду (електрони/дірки) для кожного зразка та температурних інтервалів [4.2 - 550 K], а також концентрації домішок $10^{15} - 10^{19} \text{ см}^{-3}$.

Таким чином, матеріали представлених досліджень мають цілісний характер, базуються на методологічному та теоретичному підході, основою якого є принцип близькодії, або локальності електричної взаємодії носіїв струму із розсіюючими центрами. Зміст дисертації логічно представляє проведений об'єм досліджень - від формулювання задачі, визначення мети, обґрунтування використання близькодючих моделей, систематизація отриманих результатів та їх використання для інтерпретації експериментів для сполук $A^{II}B^{VI}$, $A^{III}B^V$.

Оформлення дисертації відповідає вимогам ДАК МОН України, робота написана доступною мовою, з належним теоретичним обґрунтуванням і містить багатий ілюстративний матеріал по даних експериментальних досліджень.

Автореферат синтезує основні положення дисертації і відображає її зміст.

Як відзначалося вище, рецензована робота дає новий альтернативний підхід для описання явищ переносу у напівпровідниках. Отримані у ній результати важливі для розуміння природи кінетичних явищ, зокрема, для сполук $A^{II}B^{VI}$, $A^{III}B^V$.

По суті рецензованої роботи можна зробити *слідуючи зауваження*:

- При порівнянні теоретичних температурних залежностей рухливості електронів в $Zn_xHg_{1-x}Te$ (с.260), $Zn_xHg_{1-x}Se$ (с.268), нітриді галію (с.273) та важких дірок в $Zn_xCd_{1-x}Te$ (с.321) з експериментальними даними автор стверджує, що в інтервалі низьких температур спостерігається різний нахил теоретичних кривих $\mu(T)$ та експериментальних даних. Автор пояснює це неповнотою моделі розсіяння носіїв заряду на центрах статичної деформації (СД), де, можливо, повинна бути врахована кутова залежність потенціалу взаємодії. Виникає питання: чи відомо з літератури спроби описати кутову залежність СД - потенціалу взаємодії? Якщо ні, то чи може автор запропонувати метод вирішення цієї задачі? Це б дозволило краще узгодити теорію та експеримент.
- Відомо, що в напівпровідниках зі структурою вюртцит теорія груп передбачає існування різних оптичних коливальних мод: моди A_1 та E_1 – полярні оптичні коливання; моди $B_1^{(1)}$, $B_1^{(2)}$, $E_2^{(1)}$, $E_2^{(2)}$ – неполярні оптичні коливання. Як автор під час розрахунку ймовірностей переходу носія при розсіянні на оптичних фонах бере до уваги цю складну структуру оптичних коливань кристалу? На жаль, в дисертації відсутній опис методики врахування структури оптичних коливань.
- В списку праць автора фігурують роботи: [329] – O.P. Malyk, S.V. Syrotyuk. New scheme for calculating the kinetic coefficients in CdTe based on first-principle wave function. // *Comp. Mater. Sci.* – 2017. – V. 139. – P. 387–394 ; [331] – O.P. Malyk, S.V. Syrotyuk. Electron scattering on the short-range potential of the point defects in sphalerite GaN: calculation from the first principles.// *J. Nano- Electron. Phys.* – 2017. – V. 9. – N 6. – P. 06007-1 – 06007-6. В них, судячи з назви та змісту праць, автори виходять з перших принципів і використовують для розрахунків чисельно задану хвильову функцію електрона в кристалі. Такий підхід дозволяє виключити більшість підгінних параметрів. В зв'язку з цим виникають питання: 1) як автор досягає виключення підгінних параметрів? 2) на скільки теоретичні криві $\mu(T)$, отримані методом з підгінними параметрами відрізняються від таких же кривих, отриманих на основі чисельно заданої хвильової функції електрона?
- При розрахунку ймовірності переходу електрона зі стану k в стан k' при розсіянні на акустичному фоні автор отримує шість матричних елементів (формули (2-74)). Після процедури усереднення цих матричних елементів автор вибирає автор вибирає найбільший з них і прирівнює до

константи акустичного потенціалу деформації E_{AK} , значення якої вибирається з експерименту. Наскільки коректний такий спосіб вибору величини E_{AK} ? Чи відомий метод більш точного визначення константи акустичного потенціалу деформації E_{AK} ?

- 3-й розділ дисертації містить метод розв'язання рівняння Больцмана для довільного відхилення функції розподілу від рівноважного значення, проте формула (30) автореферату, чи (3.2) дисертації враховує лише перший член розкладу у ряд Тейлора. Пробна ж функція $\Phi_n(\epsilon)$ у цих формулах містить розклад по степенях ϵ^n , $n=1,2,3..$, що можливо лише при врахуванні вищих членів ряду Тейлора. Чи не має тут протиріччя при виборі пробної функції?

- Щодо стилістики роботи. В тексті дисертації є недоречні посилання на спеціальну теорію відносності, яка стосується сил гравітації та аж ніяк не пов'язана із близькодією. Автореферат дисертації містить терміни «дискретна структура кристалу», що дисертант має на увазі? У стеклах вона відсутня? У авторефераті не відображено порівняння теоретичних кривих $\mu(T)$, отриманих на основі близькодіючих та далекодіючих моделей розсіяння, що відноситься до п. 8 наукової новизни одержаних результатів. Зауважу, що в тексті самої дисертації такі порівняння присутні.

Зроблені зауваження не впливають на хороше враження від дисертаційної роботи Малика О.П. та не ставлять під сумнів наукові та прикладні результати його роботи для розвитку фізика напівпровідників та діелектриків. Вибір теми дослідження, проведений об'єм досліджень, їх комплексність та обґрунтованість отриманих результатів свідчать про високу фахову підготовку дисертанта. Вважаю, що дисертаційна робота на тему «ЯВИЩА ПЕРЕНОСУ В НАПІВПРОВІДНИКАХ $A^{II}V^{VI}$ ТА $A^{III}V^V$ НА ОСНОВІ БЛИЗЬКОДІЮЧИХ МОДЕЛЕЙ РОЗСІЯННЯ НОСІВ ЗАРЯДУ», відповідає встановленим вимогам ДАК МОН України, а її автор, Малик Орест Петрович заслуговує присудження наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.10 – Фізика напівпровідників і діелектриків. 01. Фізико-математичні науки.



Завідувач відділом Інституту електронної фізики
НАН України, д.ф.-м. н., професор

В.Т. Маслюк

Гідніс зав. відділом ІЕФ НАН України, д.ф.-м.н. Маслюка В.Т. засвідчую:

Вчений секретар ІЕФ НАН України, к.х.н.

Л.Г. Романова