

ВІДГУК

Офіційного опонента Майзеліса Захара Олександровича

на дисертаційну роботу

Бойка Ігоря Володимировича

**«ТЕОРІЯ ЕЛЕКТРОННИХ ПРОЦЕСІВ ТА ВЗАЄМОДІЇ ЕЛЕКТРОНІВ З
АКУСТИЧНИМИ ФОНОНАМИ У АРСЕНІДНИХ ТА НІТРИДНИХ
НАПІВПРОВІДНИКОВИХ НАНОСТРУКТУРАХ»**

представлену на здобуття наукового ступеня доктора фізико-
математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика

Актуальність теми дисертації

Дисертаційна робота Бойка І.В. присвячена теоретичному вивченню станів та взаємодії квазічастинок у багатошарових наносистемах. Актуальність такого дослідження вмотивована не тільки значним науковим інтересом, але й безпосереднім практичним значенням, оскільки в сучасній напівпровідниковій електроніці існує широке коло застосування електронних та суміжних із ними процесів, які відбуваються у багатошарових наносистемах із різноманітною геометрією та функціональною базою. Для прикладу, нанодроти із графену мають значні перспективи у розробці надміцних функціональних матеріалів, масиви напівпровідникових квантових точок чи дротів є функціональною базою сонячних батарей, плоскі наносистеми або ж резонансно-тунельні структури є складовими елементами різноманітних оптоелектронних пристроїв, зокрема квантових каскадних лазерів та детекторів. При цьому в якості напівпровідникової бази для таких наноструктур можуть виступати як арсенідні напівпровідники, які забезпечують ефективну роботу наноприладів лише в низькотемпературному режимі так і нітридні напівпровідники, які мають набагато кращу температурну стійкість, проте анізотропія їх властивостей зумовлює велику різноманітність теоретичних проблем, які досі є не вирішеними. Саме тому, вміння теоретичного прогнозування тих чи інших властивостей та залежностей електронних процесів в наноструктурах такого типу є надзвичайно важливою науковою проблемою, що й визначає актуальність дисертації в цілому.

Обґрунтованість наукових положень, висновків і рекомендацій

В представленій теоретичній роботі здобувач поставив собі за мету виконати дослідження як електронних процесів, що пов'язані із тунельним транспортом у відкритих наноструктурах так і дослідити важливі аспекти взаємодії електронів та екситонів з акустичними фононами, а також взаємодію зовнішніми змінними полями, внутрішніми постійними полями, дисипативними факторами. Слід виділити той факт, що спершу аспекти взаємодії електронів та екситонів досліджуються у рамках моделей закритих наносистем, тоді як проблеми тунельного транспорту електронів досліджуються у рамках моделей відкритих наносистем. Знаковим фактом є те, що дисертант знаходить підходи та методи які дозволяють зробити синтез застосовуваних моделей й у такий спосіб досягти більшої реалістичності в описанні конкретних фізичних процесів. Для реалізації цього здобувач самостійно розвиває варіаційні методи та глибоко модифікує метод квантово-механічних інваріантів для застосування до задач квантової теорії розсіяння.

Обґрунтованість наукових положень, висновків і рекомендацій, що подані в дисертації визначається широкою апробацією результатів дисертації на міжнародних конференціях та журнальними публікаціями у високореєтингових закордонних фахових виданнях.

Достовірність і новизна наукових положень, висновків та результатів, отриманих автором дисертації, значимість отриманих результатів для науки

У своєму дослідженні дисертант вміло комбінує різні теоретичні методи та підходи до вирішення поставлених задач. Водночас він постійно верифікує отримані теоретичні результати, порівнюючи із експериментальними результатами, чи результатами комп'ютерного моделювання, іншими конкурентними методами. Це особливо гарно продемонстровано при розробці теорії електронних станів у нітридних наноструктурах та методу розрахунків

потенціальних схем цих наносистем, де отримані результати порівнюються із результатами двох інших методів та результатами експерименту й у такий спосіб встановлюється ефективність запропонованого дисертантом методу. А при дослідженні задач із тунелювання електронного потоку взаємодіючого із змінними зовнішніми полями дисертант вдало модифікує метод Льюїса-Різенфілда, до цього застосований до задач із тематикою дуже далекою від тематики дисертації. Отже, завдяки такому багатогранному підходу у вирішенні поставлених задач, можна впевнено стверджувати про достовірність отриманих результатів та висновків, які подано в даній дисертаційній роботі.

Дисертаційна робота розпочинається із вступу, в якому наведено всі пункти відповідно до вимог оформлення дисертації. Зокрема, у вступі висвітлено актуальність дослідження, чітко поставлено мету та завдання, що вирішуються в дисертації. Вказана наукова новизна отриманих результатів та їхнє практичне значення.

Результати, що подані у дисертаційній роботі є новими. Зокрема, кожен розділ дисертації містить результати досліджень, виконаних здобувачем й починається коротким оглядом досліджуваної проблематики та літератури що з нею пов'язана.

В першому розділі розвивається теорія тунельного транспорту електронів в резонансно-тунельних структурах за їх взаємодії із змінним електромагнітним полем у наближенні слабкого сигналу при реалізації двофотонних квантових переходів. Ця теорія є цілком аналітичною що є її перевагою та дозволяє отримати відповідні вирази для хвильової функції, густини електронного струму та електронної провідності, а також дозволяє отримати величину підсилення лазерної генерації у двофотонних переходах у порівнянні з однофотонними. Дана теорія служить початковою базою та відправним пунктом для подальших досліджень. Завдяки розрахункам на основі побудованої теорії вдалось отримати принцип відшукування геометричних конфігурацій наноструктур в яких відбувається підсилення лазерної генерації у двофотонних квантових переходах, що має велике практичне значення для роботи двоколірних квантових лазерів.

В другому розділі дисертації представлено теорію, яка розв'язує проблему тунельного транспорту електронів у наноструктурах, що взаємодіють із змінним просторовим зарядом, створюваним електронним потоком із довільною концентрацією. Запропоновано аналітичний підхід до розв'язання нестационарної системи рівнянь Шредінгера-Пуассона. Досліджено вплив просторового статичного та динамічного зарядів на резонансні енергії та резонансні ширини електронних квазістационарних станів та електронну провідність. Встановлено суто дисипативну природу змінного просторового заряду та необхідність врахування цього чинника в наноприладах.

Третій розділ присвячений розвитку аналітичного методу розрахунку потенціальних профілів наноструктур на основі нітридних напівпровідників, в рамках якого враховуються анізотропні властивості нітридів, зокрема поля спонтанної та п'єзоелектричної поляризацій, обмінно-кореляційні ефекти, поверхневі заряди, виникаючі на межах шарів наносистем. В розділі чітко прослідковується подальший розвиток та узагальнення теоретичних методів, яким було дано початок у другому розділі. Запропонована теорія дала змогу чітко та послідовно разом із проблемою розрахунку енергетичних схем нітридних наноструктур також і розв'язати електрону задачу. Завдяки цьому, також вперше було виконано розрахунки енергетичних спектрів електрона в багатошарових нітридних наноструктурах та сили осцилятора квантових переходів.

В четвертому розділі дисертації, враховуючи необхідність врахування фізичних процесів у нітридах, що пов'язані із деформацією напівпровідникового континууму розвинена аналітична теорія акустичних фононів. Побудована теоретична процедура, що дозволила отримати вирази для фононних мод та компонент поля зміщення усіх виникаючих типів акустичних фононів, а саме: зсувних, флексуральних та ділататіональних. Виконано дослідження усіх груп спектрів акустичних фононів, виникаючих у дво- та трикомпонентних нітридних наноструктурах, встановлено відмінності у поведінці їх полів зміщення. Для порівняння також досліджено спектри акустичних фононів у арсенідних напівпровідникових наноструктурах й показано значні їх відмінності.

П'ятий розділ містить розроблену дисертантом теорію взаємодії електронів з акустичними фононами. У ньому узагальнено підходи до опису акустичних фононів у нітридних наносистемах з урахуванням п'єзоелектричного ефекту, який вони створюють. З'ясовано, що в нітридних наносистемах взаємодія електронів зі зсувними акустичними фононами можлива виключно через механізм п'єзоелектричного потенціалу. Водночас взаємодія електронів із флексуральними та ділататіональними акустичними фононами може відбуватися як за допомогою деформаційного, так і п'єзоелектричного потенціалів. За допомогою методу мацубарівських функцій Гріна отримано перенормовані електронні спектри, змінені через взаємодію з акустичними фононами, зокрема визначено зміщення рівнів енергії та згасання їх спектра. Вперше виявлено, що у широких температурних діапазонах обидва механізми електрон-фононої взаємодії (деформаційний і п'єзоелектричний) вносять співмірний вклад у загальну взаємодію електронів з фононами. Це призводить до розширення спектральної смуги поглинання в квантових каскадних детекторах інфрачервоного діапазону електромагнітних хвиль.

Шостий розділ дисертації за напрямом зосереджений на розробці математичних методів для моделювання електронних процесів у наносистемах, які враховують взаємодію з акустичними фононами та електромагнітним полями. Теорія розвивається в основному на основі моделей відкритих наносистем із квазістаціонарними електронними станами. У цьому розділі представлено оригінальний варіаційний метод, що дозволяє описувати тунелювання електронів у наносистемах разом із внеском від акустичних фононів у вигляді залежного від часу гамільтоніана. Використання цього методу дало змогу розрахувати коефіцієнт прозорості наносистеми, а також дослідити спектральні параметри, тунельний струм та електронну провідність.

Значна частина цього великого за обсягом розділу присвячено розробці методів знаходження точних розв'язків рівняння Шредінгера для задач тунелювання електрона у присутності внутрішнього постійного електричного поля та мультичастотних електромагнітних полів, що залежать від часу. Це стало можливим завдяки модифікації методу Льюїса-Різенфілда, який до цього мав

застосування у дуже віддалених від нанофізики областях теоретичної фізики. Зокрема, встановлено зв'язок між представленням хвильової функції в межах цього методу та її поданням у квантовій теорії розсіяння. Водночас було вдосконалено та доповнено метод S-матриці розсіяння. Отримані точні розв'язки рівняння Шредінгера демонструються практичну цінність і широкі можливості запропонованого підходу для теоретичних досліджень у галузі нанофізики.

Сьомий розділ дисертації містить теоретичні дослідження екситонних станів у нітридних наноструктурах та їх взаємодії з акустичними фононами. Об'єктом дослідження виступив суміжний клас нітридних наноструктур, які дозволяють реалізацію електронно-діркових переходів. Розглянуто два типи кристалічних решіток таких наноструктур: типу вюрциту та цинкової обманки. Досліджено екситонний спектр і ефективну масу екситона, які змінюються через взаємодію з акустичними фононами за різних температур. Встановлено, що у нітридних наноструктурах з кристалічною решіткою типу вюрциту взаємодія екситонів з акустичними фононами однаково залежить від механізмів деформаційного та п'єзоелектричного потенціалів. У наноструктурах із кристалічною решіткою типу цинкової обманки домінує взаємодія, зумовлена деформаційним потенціалом. Отримані результати поглиблюють розуміння механізмів взаємодії екситонів з фононами в нітридних наноструктурах та створюють підґрунтя для оптимізації їхніх оптичних і електронних властивостей у майбутніх дослідженнях і практичних застосуваннях.

Висновки підсумовують викладені в дисертації оригінальні результати проведених досліджень. У додатку наведено перелік наукових праць здобувача, опублікованих за матеріалами дисертаційної роботи.

Повнота викладу в наукових публікаціях

Результати дослідження були повністю опубліковані в 26 статтях та 16 тезах доповідей на конференціях, які повністю відображають результати дисертаційного дослідження. Із цих 26 статей, 10 опубліковані в журналах із імпакт-фактором, серед яких 7 належать до першого (Q1) та другого (Q2) квантилів за класифікацією Scimago Journal & Country Rank. До таких

престижних міжнародних видань належать, зокрема, «Physical Review B», «Physics Letters A», «Physica B: Condensed Matter», «Superlattices and Microstructures». Загалом, 22 статті індексуються в провідних наукометричних базах Scopus і Web of Science.

Особистий внесок здобувача у всіх публікаціях за темою дисертації такі: йому належать всі формулювання наукових ідей, визначення цілей та методів дослідження, всі постановки задач, повністю аналітичні розрахунки, проведення числових розрахунків та моделювання, написання і підготовка праць до друку. Результати роботи також апробовані на міжнародних конференціях, де 6 тез доповідей були індексовані у базах Scopus і Web of Science, що підкреслює високий рівень проведених досліджень та їх міжнародне визнання.

Дисертаційна робота Бойка І.В. є цілісною і завершеною роботою, містить багато корисного і цікавого теоретичного матеріалу, який має не лише наукову цінність, але й представляє собою практичний та методологічний інтерес. Здобувачем запропоновано декілька нових оригінальних підходів щодо опису тунельного транспорту та взаємодії квазічастинок між собою, із зовнішніми та внутрішніми полями у резонансно-тунельних структурах. Академічного плагіату, фабрикації, фальсифікації чи інших проявів порушення академічної доброчесності в дисертації не виявлено, дисертація містить лише положення та результати отримані у публікаціях, що захищені за темою дисертації.

Тим не менше, хотілося би поставити декілька запитань та зробити декілька зауважень:

1) Дисертант у своєму дослідженні обмежився виключно розглядом балістичного когерентного електронного транспорту. Було б доцільно дослідити або окремо розглянути випадки відхилення від цього режиму та фізичні процеси, які з цим пов'язані.

2) Особливу увагу в дисертації приділено п'єзоелектричному ефекту, що пов'язаний з акустичними фононами. Це доцільно, оскільки взаємодія з акустичними фононами через п'єзоелектричний потенціал є значною. Проте всі ці результати в дисертації стосуються виключно нітридних наноструктур. Чому

аналогічні розрахунки не були пророблені для арсенідних наноструктур?

3) Одним з центральних питань, що вирішується у дисертації є теорія акустичних фононів. Які з цих результатів можна розповсюдити для фононів оптичного діапазону, а для яких це не буде мати смислу?

4) Нітридні резонансно-тунельні структури є складовими частинами квантових каскадних лазерів чи детекторів, які працюють виключно на електронних переходах. Чим тоді зумовлено необхідність дослідження взаємодії екситонів з акустичними фононами?

Варто зауважити, що наведені вище зауваження мають несуттєвий характер і жодним чином не впливають на загальну позитивну оцінку дисертаційної роботи.

Вважаю, що дисертаційна робота Бойка Ігоря Володимировича «Теорія електронних процесів та взаємодії електронів з акустичними фононами у арсенідних та нітридних напівпровідникових наноструктурах» виконана за всіма вимогами спеціальності 01.04.02 – теоретична фізика, повністю відповідає всім вимогам МОН України щодо докторських дисертацій, що містяться у пунктах 7, 8 та 9 «Порядку присудження та позбавлення наукового ступеня доктора наук» затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 17 листопада 2021 р. № 1197 із змінами, внесеними згідно з Постановами Кабінету Міністрів України № 502 від 19.05.2023 та № 507 від 03.05.2024, а її автор заслуговує присудження наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.24 – теоретична фізика.

Офіційний опонент

доктор фізико-математичних наук,

доцент,

старший науковий співробітник відділу радіофізики твердого тіла

Інституту радіофізики та електроніки

ім. О.Я. Усикова НАН України

Захар МАЙЗЕЛІС