

Відгук

офіційного опонента на дисертаційну роботу Бойка Ігоря Володимировича «Теорія електронних процесів та взаємодії електронів з акустичними фононами у арсенідних та нітридних напівпровідникових наноструктурах», подану на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика

Актуальність обраної теми дисертації

Дисертаційну роботу Ігоря Бойка присвячено актуальним питанням теорії низьковимірних систем, а саме напівпровідникових багатосарових наносистем із плоскою геометрією (2D – структури). Теоретичні й експериментальні дослідження напівпровідникових наносистем із різною геометрією, зокрема плоских резонансно-тунельних наноструктур таких типів пов'язані також із безпосередніми технологічними можливостями використання їх як складових наноприладів таких як квантові лазери та детектори, що працюють в широких діапазонах електромагнітних хвиль й мають застосування в електроніці, медицині, військовій техніці. В дисертації розглянуто питання теорії електронних стаціонарних та квазістаціонарних станів, теорії акустичних фононів, електрон-фононої та екситон-фононої взаємодії та кінетики електронного транспорту в напівпровідникових наносистемах. Розвинуто нові моделі, що адекватно описують електронні процеси в вже створених наноструктурах та дозволяють кількісно прогнозувати та аналізувати нові явища у цих системах, що є мірилом актуальності обраної теми дисертації.

Дослідження електронних станів, електронного транспорту за присутності внутрішніх та зовнішніх полів, а також електрон-фононої взаємодії для напівпровідникових багатосарових систем досі залишається однією з важливих задач фізики низьковимірних систем та квантової теорії розсіяння. Вплив просторового заряду, анізотропії, різного типу фононів, температури, зовнішніх статичних та змінних полів тощо спричиняє значне різноманіття режимів

тунелювання в наноструктурах й поведінки самих електронних станів, а тому їх дослідження становить значний теоретичний та практичний інтерес. Дослідження електронних процесів не лише у моделях закритих наносистем, але й розгляд динамічних характеристик електронних квазістаціонарних станів у реалістичних моделях відкритих наносистем є важливим з огляду на розширення можливостей експериментальної реалізації наносистем перевірки на них розроблених теоретичних моделей. Теоретичний аналіз згаданих вище проблем потребує удосконалення наявних і побудови нових методів досліджень, як аналітичних, так і суто математичних методів теоретичної фізики. Зазначені вище проблеми складають ядро завдань, розв'язання яких подано в дисертаційній роботі Ігоря Бойка.

Обсяг дисертації становить 474 сторінки, із них основний текст складає 404 сторінки. Дисертація складається із вступу, семи розділів, висновків, списку використаних джерел, що налічує 290 посилань, а також в ній міститься один додаток.

***Обґрунтованість наукових положень, висновків і рекомендацій,
сформульованих у докторській дисертації, їх новизна***

У *вступі* дисертація подано актуальність її теми, зв'язок роботи із науковими програмами, планами, темами, актуалізовано мету, задачі, об'єкт та предмет дослідження, структуру дисертації, її наукову новизну та практичне значення отриманих результатів, особистий внесок здобувача у переліку робіт, що опубліковані з співавторами, відомості про апробацію результатів дисертації.

Усі розділи дисертації є місять оригінальні та нові результати досліджень. Кожен із розділів починається оглядом літератури, де конкретизується суть проблеми, яка вирішується в розділі дисертації. У такий спосіб досягається хороший взаємозв'язок між поставленими проблемами та результатами поданими у розділах дисертації.

Перший розділ дисертації присвячено дослідженню процесів генерації додаткових квантових електронних переходів у при тунелюванні електронного потоку крізь багат шарові резонансно-тунельні структури. Шляхом виконання розрахунків на основі розвиненої квантово-механічної теорії електронного транспорту в таких наносистемах встановлено геометричні конфігурації наносистем, які дають підсилення електронної провідності чи струму за рахунок генерації додаткової гармоніки у квантовому переході, відмінному від основного. Розглянуто випадки коли додаткова гармоніка має таку ж частоту, як і основний квантовий перехід, так і випадок, коли частота додаткового переходу має відмінне від нього значення. Проаналізовано перспективи практичного застосування двочастотних квантових переходів для роботи так званих двоколірних квантових каскадних лазерів.

Другий розділ присвячено розробці квантової теорії розсіяння електронного потоку відкритими наносистемами при їх взаємодії із просторовим змінним зарядом та залежним від часу електромагнітним полем. Встановлено, що для такого випадку виникає два види просторового заряду: статичний, який впливає на спектральні параметри електронних квазістаціонарних станів у наносистемі та динамічний заряд, який чинить вплив на електронну провідність. Показано, що змінний просторовий заряд є чинником дисипативного характеру, який слід враховувати при дослідженні електронного тунелювання у наноструктурах, причому внесок цього фактору безпосередньо залежить від концентрації електронів у тунельованому пучку. Подана у цьому розділі теорія є узагальненням та доповненням теорії електронних станів, що базується на розв'язках системи рівнянь Шредінгера та Пуассона, оскільки базується на повному рівнянні Шредінгера та дозволяє розглядати більше реалістичну динамічну проблему.

У *третьому* розділі побудовано аналітичний метод, що дозволяє виконувати розрахунки потенціальних схем наноструктур, що створені на основі подвійних напівпровідникових сполук нітриду галію (GaN) та алюміній

нітриду (AlN) чи їх потрійних сполук (AlGaN). Вирішено проблему врахування анізотропії властивостей таких наноструктур, що суттєво відрізняє їх від аналогічних наноструктур на основі арсеніду галію (GaAs, AlAs, AlGaAs) й основним чином виражається у виникненні сильного електричного поля, зумовленого спонтанною та п'єзоелектричною поляризаціями. Разом із розвиненим методом запропоновано підхід для відшукування самоузгоджених розв'язків системи рівнянь Шредінгера-Пуассона, що дало змогу дослідити енергетичний спектр стаціонарних станів електрона та сил осциляторів квантових переходів. Виконано порівняння результатів, отриманих на основі розвиненої теорії з результатами, що їх дають інші методи та цілком числовий підхід. Зроблено висновок про необхідність дослідження акустичних фононів в нітридних наноструктурах, оскільки вони прогнозовано є чинником виникнення деформаційних та п'єзоелектричних властивостей нітридних наносистем.

У *четвертому* розділі вперше побудовано послідовну аналітичну теорію акустичних фононів, що виникають у нітридних наноструктурах із довільною кількістю шарів. Встановлено, що в нітридних наноструктурах із плоскою геометрією та кристалічною ґраткою типу вюрциту може виникати три типи акустичних фононів: зсувні, флексуральні та ділататіональні. На основі розвиненої теорії виконано розрахунки спектрів всіх типів акустичних фононів у залежності від хвильового вектора та від геометричних параметрів наноструктур створених на основі бінарних та тернарних сполук нітридів. Виявлено утворення окремих груп фононних віток, як мають різні залежності від хвильового вектора. Досліджено величини полів зміщення зумовлених фононними модами кожної із груп.

Виконано дослідження спектрів акустичних фононів та полів їх зміщення у арсенідних наносистемах із кристалічною решіткою типу вюрциту й проаналізовано їх відмінності порівняно з нітридними наносистемами.

П'ятий розділ присвячено побудові теорії взаємодії електронів із акустичним фононами. Узагальнено теорію акустичних фононів нітридних

наносистемах для випадку урахування створюваного ними п'єзоелектричного ефекту. Показано, що в нітридних наносистемах взаємодія електронів із зсувними акустичними може відбуватись лише за рахунок механізму п'єзоелектричного потенціалу. Показано, що взаємодія, електронів з флексуральними та ділататіональними акустичними фононами можлива як за рахунок механізму деформаційного так і п'єзоелектричного потенціалу. Шляхом застосування методу температурних функцій Гріна отримано перенормовані взаємодією з акустичними фононами електронні спектри, а саме їх зміщення та згасання. Встановлено, що у широких діапазонах температур обидва механізми дають співмірні внески у величину електрон-фононної взаємодії й приводять до розширення смуги випромінювання чи поглинання у наноприладах й розраховано кількісні значення цієї величини при різних температурах.

Шостий розділ дисертації присвячених розробці математичних методів, що демонструють перехід від розгляду електронних процесів, пов'язаних з акустичними фононами та зовнішніми полями у моделях закритих наносистем до більше реалістичних моделей відкритих наносистем де електронні стани є квазістаціонарними. Так, в даному розділі запропоновано оригінальний варіаційний метод, що дозволяє описувати тунелювання електронів у наносистемах разом із підсистемою акустичних фононів. Це дало змогу розрахувати для такої теоретичної моделі коефіцієнт прозорості наносистеми, дослідити поведінку спектральних параметрів ,тунельного струму та електронної провідності. Друга частина розділу присвячена розробці методології відшукування точних розв'язків повного рівняння Шредінгера для випадку тунелювання електрона, взаємодіючого із внутрішнім постійним електричним полем, мультичастотними залежними від часу електромагнітними полями. Це вдалось зробити за рахунок глибокої модифікацію методу Льюїса-Різенфілда, що привело до встановлення зв'язку між представленням хвильової функції у методі та її поданням у квантовій теорії розсіяння, зокрема було доповнено та модифіковано метод S-матриці розсіяння. Слід також зауважити, що отримані

розв'язки повного рівняння Шредінгера є точними, не зважаючи на доволі значну складність постановок задач.

Останній оригінальний *сьомий* розділ присвячено дослідженню екситонних станів у нітридних наноструктурах та їх взаємодії з акустичними фононами. Дослідження виконані в даному розділі є логічним продовженням та розвитком проблем поставлених у третьому, четвертому та п'ятому розділах дисертації. Предметом дослідження був суміжний клас нітридних наноструктур в який є можливість реалізації електронно-діркових переходів. Для таких наноструктур досліджено випадки, коли вони можуть мати кристалічну решітку як типу вюрциту так і цинкової обманки. Досліджено екситонний спектр та ефективну масу екситона, що перенормовані взаємодією з акустичними фононами при різних температурах. Всиновлено, що для нітридних наноструктур з кристалічною решіткою типу вюрциту взаємодія екситонів з акустичними фононами визначається у рівній мірі механізмами деформаційного та п'єзоелектричного потенціалів, а у випадку кристалічної решітки типу цинкової обманки – деформаційним потенціалом.

Основний текст дисертації завершується загальними *висновками*, що підсумовують основні результати виконаних досліджень. У *Додатку* подано список праць здобувача, що опубліковані за темою дисертації.

***Повнота викладу наукових положень, висновків і рекомендацій,
сформульованих у докторській дисертації у публікаціях
зарахованих за темою дисертації***

Результати роботи було повністю опубліковано в 26 статтях та в 16 тезах доповідей на конференціях. Десять статей із 26 опубліковано в журналах з імпаکت-фактором, слід також виділити сім статей, що опубліковані у журналах віднесених до першого (Q1) та другого (Q2) квінтилів за класифікацією Scimago Journal & Country Rank. Це є такі провідні визнані міжнародні видання, такі як «Physical Review B», «Physics Letters A», «Physica B: Condensed Matter», «Superlattices and Microstructures». Загалом 22 статті індексуються у

наукометричних базах Scopus і Web of Science. В дисертації повністю відображено особистий внесок здобувача у згаданих публікаціях: слід зауважити, що безпосереднє формулювання ідей та постановок задач, визначення цілей і методів дослідження, повне виконання аналітичних і часткове проведення числових розрахунків, а також написання і підготовка наукових праць до друку були здійснені особисто автором дисертації. Крім того апробація на міжнародних конференціях відзначається тим, що 6 тез також є індексованими у наукометричних базах Scopus і Web of Science.

Результати наукових досліджень Ігоря Бойка в дисертаційній роботі є вкладеними цілком послідовно і логічно, між ними існує чіткий взаємозв'язок. Реферат дисертації повністю відображає зміст її розділів, викладених у них основних положень, ідей та результатів. Достовірність усіх результатів та обґрунтованість висновків дисертації зумовлюється використанням реалістичних моделей, а також ефективних числових та математичних методів, частина яких розвинена дисертантом самостійно. Порушень академічної доброчесності у дисертації, рефераті та списку праць зарахованих за темою дисертації не виявлено.

Автором дисертації було отримано низку нових теоретичних результатів, зокрема: детально досліджено формування конфігурацій, підсилюючих електрону провідні наносистем за рахунок двофотонної генерації; побудовано теорію та ретельно досліджено процес тунелювання електронів в наноструктурах за наявності просторового динамічного заряду та змінного електромагнітного поля; побудовано аналітичну теорію акустичних фононів, а також електрон-фононної і екситон-фононної взаємодії у нітридних наноструктурах, досліджено механізми і прояви такої взаємодії функції. Особливої уваги заслуговують розроблені в дисертації варіаційний метод та модифікація методу Льюїса-Різенфілда, що носять загальний характер і можуть значною мірою застосовуватись у теорії тунельного транспорту в напівпровідникових наноструктурах.

У процесі ознайомлення з дисертацією Ігоря Бойка у мене виникли деякі запитання й зауваження, які подано далі:

1. У дисертації зустрічаються орфографічні помилки та описки.
2. У всіх розділах дисертації автор використовує в електронному та дірковому гамільтоніанах представлення виду для оператора кінетичної

енергії у вигляді: $-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z}$, що вказує на координатну залежність ефективної маси. При цьому про доцільність вибору саме такого представлення не повідомляється, а інші можливі представлення не розглядаються. Варто було обговорити в дисертації більш детально проблему впорядкування маси залежної від координат та оператора імпульсу в операторі кінетичної енергії.

3. У четвертому розділі дисертації під час розрахунків спектрів акустичних фононів в нітридних наноструктурах використовується система одиниць СІ, а під час розрахунків спектрів акустичних фононів в арсенідних наноструктурах використовується Гаусова система одиниць. Оскільки розрахунки є однотипними не зрозуміло доцільності такого використання систем одиниць.
4. Безпосередні розрахунки дисертант виконує одразу для складних багатоямних наноструктур. А чи виконувались розрахунки для якихось спрощених моделей наносистем, скажімо з одною потенціальною ямою?

Згадані вище зауваження жодним чином не впливають на наукову новизну, отримані дисертантом основні положення, висновки й практичне значення результатів дисертації й загальне позитивне враження від роботи. Враховуючи це слід зробити висновок, що дисертація Ігоря Бойка є завершеною науковою працею в якій вирішено ряд наукових завдань у теорії електронного транспорту та електрон-фононної взаємодії у низьковимірних

напівпровідникових структурах.

Дисертаційна робота написана з дотриманням усіх норм науково-технічної мови, а виклад матеріал в ній відповідає усім вимогам для стилю науково-дослідної літератури. Реферат дисертації є оформлений згідно вимог, а його зміст у достатній мірі відображає основні положення та результати досліджень, що подані у дисертації. Дисертаційне дослідження відповідає паспорту спеціальності 01.04.02 – теоретична фізика.

З огляду на актуальність, достовірність, цінність та наукову новизну отриманих результатів, як дисертаційної роботи в цілому, вважаю, що дисертаційна робота «Теорія електронних процесів та взаємодії електронів з акустичними фонами у арсенідних та нітридних напівпровідникових наноструктурах» відповідає усім вимогам, що подані 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 № 507 від 03.05.2024, а сам дисертант Бойко Ігор Володимирович безумовно заслуговує присудження йому наукового ступеня доктора фізико-математичних наук зі спеціальності 01.04.02 – теоретична фізика.

Офіційний опонент

доктор фізико-математичних наук, професор,

завідувач кафедри теоретичної фізики

імені професора Івана Вакарчука

Львівського національного університету

імені Івана Франка



В.М. Ткачук

Підпис проф. В. Ткачука
засвідчую
Підпис