



Відзив

офіційного опонента на дисертаційну роботу
Кулик Надії Ярославівни
“Вплив напруженої гетеромежі на електронні, дифузійні та електричні властивості наногетеросистем”,
подану на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла

Актуальність теми дисертаційної роботи. Останні десятиліття квантові точки – нанорозмірні вкраплення у напівпровідниковому або діелектричному середовищі, з їх корисними фізичними властивостями знаходять широке застосування в різних областях напівпровідникової техніки: оптоелектроніці, лазерній техніці, сонячній електроніці, польових транзисторах, некогерентних св ітловипромінюючих пристроях та у багатьох інших сферах. Фізика квантових точок та наноструктур із квантовими точками багата і різноманітна, вона охоплює квантові явища, класичну електродинаміку, електрофізику, термодинаміку, механіку твердого тіла тощо. Як було з'ясовано в останні роки, в багатьох випадках формування атомного кластеру в оточенні іншого матеріалу супроводжується механічною деформацією стиснення або розтягування квантової точки, в залежності від співвідношення між постійними ґраток матеріалів. Тому серед різновидів квантових точок своє місце займають так звані напружені гетеро структури, властивостям яких присвячена представлена дисертаційна робота. Вивчення квантових та електричних властивостей напружених гетеро границь, в тому числі, сферичних, InAs у матриці GaAs та твердих розчинів цих матеріалів представляє інтерес для напівпровідникової техніки та технології з точки зору нових методів формування структур на квантових точках: діодів Шоттки, тунельних діодів, квантових транзисторів, елементів електронної пам'яті, світлосприймаючих структур. Оскільки електрофізичні та оптичні властивості наногетероструктур визначаються просторовим розподілом густини та спектром носіїв заряду то важливим стає вивчення впливу на них розмірів, форми, композиційного складу та деформаційних ефектів. Зокрема, останні впливають на форму потенційної ями для електронів (дірок) у квантових точках що проявляється в особливостях вольт-амперної характеристики та оптичних властивостях. Слід визнати, що ціла низка питань, пов'язаних якраз із впливом пограничної деформації квантова точка – матриця на квантово-розмірні стани електрона в квантовій точці, на можливий перерозподіл профілю точкових дефектів наногетеросистем GaAs/InAs/GaAs та ZnTe/CdTe/ZnTe, на електрофізику поверхнево-бар'єрних наноструктур досі залишається недостатньо вивченою. Як приклад, можна навести специфічні особливості ВАХ напружених структур типу діода Шоттки з шаром квантових точок. Тому, теоретичні дослідження природи і характеру формування деформованої гетерограниці в наноструктурах із квантовими точками, її впливу на електронні стани, на розподіл та стимульовану кінетику дефектів у напружених наногетеросистемах GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs (ZnTe/Zn_{1-x}Cd_xTe/ZnTe) та дослідження електричних властивостей діодів Шоттки з вбудованим шаром квантових точок в область просторового заряду напівпровідника є актуальними, як з наукової, так і з практичної сторін в плані створення нового покоління діодів Шоттки. Тому поставлене в дисертаційній роботі завдання створення квантово-розмірні стани електрона в напруженій наногетеросистемі InAs/GaAs з неоднорідно-деформованою гетеромежею квантова точка – матриця, просторово-часовий перерозподіл точкових дефектів у напружених наногетеросистемах GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs, вольт-амперна характеристика (ВАХ) поверхнево-бар'єрної структури виду Шоттки з вбудованим шаром квантових точок в область просторового заряду напівпровідника слід визнати актуальним та науково обґрунтованим, а обрані методи на основі самоузгодженого електрон-деформаційного потенціалу, теорії збурення форми поверхні квантової точки, функції Гріна, метод самоузгодженого дифузійно-деформаційного зв'язку, метод послідовних надрелаксацій, метод самоузгоджених граничних умов достатньо плідними та ефективними.

За своєю структурою дисертаційна робота Кулик Н.Я. складається із вступу, одного оглядового розділу та трьох оригінальних розділів з результатами виконаних розрахунків, загальних висновків та переліку використаних літературних джерел із 148 найменувань. Загальний обсяг дисертації складає 128 сторінок, робота містить 24 рисунків та одну таблицю.

У вступі, згідно існуючих вимог, обґрунтовується актуальність теми дисертації, формулюються мета і завдання досліджень, наводяться відомості щодо наукової новизни і практичного значення отриманих результатів, а також особистого внеску здобувача, апробації та публікацій за результатами проведених досліджень.

У першому розділі розглянуті існуючі моделі та методи досліджень самоузгодженої взаємодії пружних деформацій та електронних станів в напружених наногетеросистемах із гладкою та негладкою гетерограницею. Із аналізу літературних джерел робиться висновок стосовно важливості процесів деформаційного впливу на дифузію точкових дефектів в напружених наногетеросистемах для технології введення домішок при виготовленні оптоелектронних матеріалів, в тому числі, як механізму контролю середнього параметру ґратки, стехіометричного складу і потоків іонів. Також у розділі розглядаються стаціонарний просторовий розподіл електронів в структурі з напруженою квантовою ямою і електричні властивості поверхнево-бар'єрних структур типу Шотткі з вбудованим в область просторового заряду напівпровідника одним шаром напружених квантових точок. Робиться висновок про відсутність теоретичних розробок просторово-часового перерозподілу точкових дефектів у напівпровідникових напружених гетероструктурах та виникнення S-нестабільностей ВАХ у діодах Шотткі з стисненими квантовими ямами.

У другому розділі досліджено вплив на електронні стани квантової точки деформації границі розділу квантова точка - матриця, розраховано профіль потенціальної ями і енергетичний спектр електрона в квантовій точці з врахуванням самоузгодженої електрон-деформаційної взаємодії, в рамках теорії збурень досліджено вплив сферичної та аксіально-симетричної деформованої гетерограниці на квантові стани зарядів, локалізованих в квантовій ямі. Показано, що в випадку напружених квантових точках крім механічної складової параметра деформації виникає додатково електронна складова деформації, яка суттєво проявляється у зміні форми потенціальної енергії електрона в структурі при значних концентраціях електронів провідності.

У третьому розділі розглянуто модель напружених гетероструктур GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs (ZnTe/Zn_{1-x}Cd_xTe/ZnTe) де деформація стиснення квантової ями In_xGa_{1-x}As або Zn_{1-x}Cd_xTe моделювалась параболічною залежністю з спаданням до нуля у центрі ями. функцією. За допомогою інтегральних перетворень Лапласа розглядалась самоузгоджена задача нестационарної кінетики вакансій у тришаровій наноструктурі з стиснутим середнім прошарком. Показано, що індукований неоднорідним деформаційним полем дифузійний потік точкових дефектів при стиску має напрям протилежний до градієнта деформації матеріалу в середньому шарі гетероструктури, а при розтягу потік відбувається вздовж напрямку градієнта.

У четвертому розділі досліджено електрофізичні властивості поверхнево-бар'єрних структур типу Шотткі з вбудованим шаром напружених квантових точок. Методом послідовних надрелаксацій знайдено розв'язок двовимірного рівняння Пуассона із використанням п'ятиточкової різницевої схеми. Проведені числові розрахунки розподілу екіпотенціальних ліній в структурі та околі квантових точок при різних значеннях параметрів, які використовувались у експериментальній роботі. Зроблено висновок, що наявність періодично розміщених квантових точок в області просторового заряду приводить до виникнення періодичних n-n⁺ або p-n переходів в бар'єрній структурі Шотткі. Крім того, за допомогою дрейфово-деформаційно-дифузійної моделі контакту метал – напівпровідник з вбудованим шаром КТ, знайдено ВАХ поверхнево-бар'єрної структури Шотткі та досліджено їх природу та особливості у вигляді неоднозначної залежності току від напруги.

У висновках підсумовано основні результати роботи.

Всі розділи дисертації завершуються формулюванням загальних висновків.

У розділі Література наведений перелік літературних джерел. В цілому, обсяг у 148 посилань адекватно відображує сферу квантових та електрофізичних властивостей напружених

гетероструктур, якій присвячено дисертаційну роботу; за часом появи публікацій від початку розробки ідей деформаційного потенціалу до 2015 року.

Основні результати дисертаційної роботи.

Серед отриманих дисертанткою результатів хотілося б відмітити (1) розвинутий метод розрахунку квантових станів локалізованих в квантовій точці зарядів з врахуванням самоузгодженої електрон-деформаційної взаємодії і впливу деформованої гетерограниці квантової точки з матрицею. (2) Передбачене формування завдяки електрон-деформаційному потенціалу додаткових квазітрикутних потенціальних ям в квантовій точці і квазітрикутних потенціальних бар'єрів в матриці та пониження енергії основного і збудженого станів електрона в напруженій квантовій точці (3) Встановлені умови виникнення та зникнення S-подібного характеру ВАХ низькобар'єрного діода Шоттки з вбудованим в область просторового заряду шаром квантових точок. (4) Запропоновано деформаційне стиснення квантової точки як метод впливу на точкові дефекти та виявлення умов очищення робочої зони напруженої трьохшарової наноструктури від точкових дефектів (вакансій).

Ступінь обґрунтованості, достовірності та новизни наукових положень, висновків, рекомендацій. На користь роботи свідчить застосування широко відомих і апробованих методів, якими є метод функцій Гріна, метод варіаційного числення, метод інтегрального перетворення Лапласа, яке використовувалось для розв'язку системи рівнянь самоузгодженої кінетики дефектів. Також у позитивному сенсі слід відмітити застосування методу послідовних надрелаксацій, який дозволяє підвищити точність розрахунку просторової залежності електронного потенціалу структури з напруженою квантовою ямою. Достовірність застосованої самоузгодженої моделі електрон-деформаційної взаємодії доводиться гарним співпадінням результатів теоретичних розрахунків з експериментальними даними для ВАХ структур з напруженими квантовими точками.

Практичне значення одержаних результатів може проявлятися у проектуванні та виборі оптимальних технологічних режимів створення низькобар'єрних діодів як детекторів мікрохвильового випромінювання, та нового класу високочастотних генераторів. Також результати даного дослідження впливу напружених гетерограниць на просторовий розподіл точкових дефектів можуть бути використані для експериментального методу очищення дефектів з епітаксійних шарів спрямованими деформаціями структури. Результати та розглянуті в роботі моделі напружених структур можна застосовувати в спецкурсах фізики твердого тіла та матеріалознавства в процесі підготовки спеціалістів і магістрів.

Дисертанткою Кулик Н.Я. отримано велику кількість результатів, які задовольняють критеріям наукової новизни, достовірності та практичної значущості. Отримані дані узгоджені з результатами експериментів, виконаних іншими дослідниками.

Все ж-таки деякі аспекти роботи викликають зауваження і потребують спеціального обговорення в критичній частині відзиву.

1. Структура дисертації.

В цілому, за структурою, дисертаційна робота складена майже ідеально. Логічно обґрунтованими виглядають розподіл на розділи – їх чотири, причому введенню у тематику присвячено перший розділ, а три інших представляють результати оригінальних досліджень.

1.1. Оскільки надійність запропонованої фізичної моделі напруженої квантової точки та супутніх ефектів має велике значення, можливо, слід було приділити окрему увагу співставленню із результатами подібних задач для інших об'єктів та моделей.

1.2. В роботі широко представлені розрахункові дані, тому блок-структуру деяких програмних кодів, можливо, слід було винести у Додаток.

2. Постановка фізичної задачі та методи розрахунку.

Основна ідея дослідження полягає у тому, що деформація зв'язків на межі контакту стисненої сферичної квантової точки InAs із матрицею GaAs приводить до появи контактної різниці потенціалу і додаткового бар'єру, що, в свою чергу, відображається на квантових та електрофізичних властивостях системи матриця-квантові точки, в тому числі, на вольт-амперних характеристиках. Модель містить уявлення про виникнення (завдяки невідповідності постійних ґраток КТ і оточуючої матриці) суто радіальної деформації стиснення u_r квантової точки в процесі її зародження та зростання. Кутові деформаційні зсуви u_θ та u_ϕ вважаються відсутніми.

2.1. На користь нехтування кутовими деформаціями в процесі формування КТ InAs у матриці GaAs свідчило би підтверджене експериментально формування сферичних або близьких до сферичних форм. Але в роботі такі дані не приводяться.

2.2. З точки зору постановки задачі представляється важливою оцінка pro et contra можливого внеску в енергію електрона в КТ також п'єзоелектричного потенціалу, що виникає у InAs з деформацією за даними (див. Physical Review B 74, 155304 (2006)).

Крім того, залишилася без згадки ще одна далекодіюча складова потенціалу - потенціал зображення згенерованих поблизу границі КТ із матрицею зарядів, якій може суттєво впливати на бар'єр та глибину потенційної ями (стаття Appl. Phys. Lett. 100, 173104 (2012)).

2.3. Макроскопічний підхід, або наближення суцільного середовища, оперує величинами, усередненими за великим у порівнянні зі сталою ґратки масштабом, тому при використанні моделі Пуассона з діелектричною проникністю для подібних малих кластерів нанометрових розмірів слід було привести декілька слів в обґрунтування континуального наближення та окреслити нижню границю розмірів при яких модель залишається дієвою (Розділи 2, 3, 4). Так само поняття ефективної маси (граничні умови, Розділ 2) втрачає сенс при занадто малих розмірах кластеру.

2.4. Зауваження стосовно наближення: *енергія попарної пружної взаємодії КТ замінена енергією взаємодії кожної КТ з усередненим полем пружної деформації* $\sigma_{ef}(N-1)$ всіх інших КТ. Оскільки вважається, що сферичну симетрію наближення не порушує, то для всіх задач (крім задач параграфів 2.5. 2.6) це означає однорідний розподіл КТ в об'ємі для формування сферично-симетричного впливу на дану квантову точку. Але в дійсності розглядається лише прошарок квантових точок, або, навіть, низка точок, як у розділі 4.

3. Зауваження до фізичних результатів.

В цілому, в дисертації стиль представлення результатів розглянутих задач зауважень не викликає, він високоякісний: описання моделі-постановка задачі-метод розв'язку-результати-пояснення-обговорення-висновки.

3.1. У Розділі 2, параграф 2 та 3, з застосуванням макроскопічного рівняння Пуассона розглянуто сферично симетричну задачу електрона в одиночній напруженій сферично симетричній квантовій ямі в діелектричному оточенні. Роль радіальних хвильових функцій зрозуміла, але яку роль відіграє концентрація квантових точок N_{QD} у виразі (2.19) для концентрації заряду всередині і поза сферичної ями? Як можна застосувати результат одиночної сферичної квантової ями до прошарку із багатьох квантових точок?

3.2. Розділ 2, параграф 5 та 6. Методом функцій Гріна розглянута задача для аксіально-симетричного збурення сферичної квантової ями у І-му наближенні теорії збурень. Чи оцінювались вплив наступних порядків на спектр?

3.3. Розділ 3, розрахунок зміни у часі просторового розподілу дефектів. Питання стосовно «очищення» робочої зони напруженої гетероструктури від точкових дефектів. Якими способами можна керувати процесом, чи оцінювались вплив температури та тиску?

3.4. Питання до дуже цікавої за постановкою та методом розв'язку задачі Розділу 4. У цьому розділі рівняння (4.1), (4.4) описують замість системи сфер систему циліндрів, витягнутих вздовж вісі Z оскільки координата z в рівняннях (4.1) та (4.4) відсутня, а h - відстань між КТ вздовж вісі Y тільки. Таким чином, виникає трактовка прошарку, як системи циліндрів.

3.5. Розділ 4, пункт 2, модель розподілу електростатичного потенціалу в поверхнево-бар'єрній структурі. Питання до картини екіпотенціальних ліній на рис. 4.2 і 4.3, які містять локальні максимуми та мінімуми всередині структури, що відповідає наявності додаткових внутрішніх джерел електричного струму. Як можна пояснити максимуми потенціалу? Топологічно така картина поля відповідає ненульовому ротору статичного потенціалу.

3.6. Розділ 4, пункт 5. На мій погляд автору слід додати до своїх досягнень знайдений достатньо цікавий результат незалежності від температури електричного опору поверхнево-бар'єрної структури типу Шоттки з вбудованим шаром КТ з параметрами R_0 , бар'єром $0.5eV$ та відстанню до вбудованого шару $L_d \sim 150\text{\AA}$ при напрузі зміщення 0.52 V (Рис. 4.7).

4. Термінологія та позначення

4.1. На мою думку, застосування терміну «неоднорідно деформаційний потенціал» щодо всебічно-стисненої квантової точки потребує окремого пояснення в тексті, оскільки для всебічного стиснення або розтягування тензор деформації є константою в об'ємі тіла. Такі випадки, за традицією, розглядаються як однорідні деформації (див. Л.Д Ландау, И.М. Лифшиц, Теория упругости §5 стор. 24)

4.2. Деякі незручності читачу надає накладення однакових позначень ΔV для зміни об'єму (стор.40) і форми потенційної ями КТ, також ϵ у багатьох формах виступає.

5 Список та посилання на літературні джерела

Літературний огляд у першому, оглядовому, розділі 1 та у вступі до розділів 2, 3, 4 достатньо повно відображує стан проблеми та розвиток теми протягом останніх десятиліть. Все ж таки, на мій погляд, декілька важливих робіт із вольт-фарадних та п'єзоелектричних досліджень напружених квантових точок у наведений перелік літературних джерел не увійшов (Zubkov, Niquet)

5.1. Також не можна признати достатньо представленою в списку джерел тему експериментальних досліджень електронної структури самоорганізованих квантових точок InAs в матриці GaAs. Згадано 51, 52, хоча цей перелік, як згадувалось вище, можна суттєво розширити.

6 Ілюстрації та таблиці

6.1 Зауваження щодо підпису до Рис. 4.1: Незрозуміло, це ланцюжок, як показано, чи латеральна структура (як теж показано)? Тоді яка симетрія надгратки КТ і чи є від неї залежність? Якщо ланцюжок, як йдеться далі, то що позначено на малюнку там InAs, а що матриця кругом сферичних квантових точок? Слід зауважити, що в роботі [111] розглядається суцільний шар германію.

7. У тексті дисертації зустрічаються дефекти оформлення і неточності.

Висловлені вище зауваження аж ніяк не знецінюють результатів дисертаційної роботи. Дисертація Кулик Надії Ярославівни складає гарне враження як за обраною

темою, так і постановкою задач та виконанням, вона є самостійним і завершеним науковим дослідженням, в якому одержані нові, цікаві і важливі результати, які будуть корисними для розвитку даної наукової сфери і створення нових напівпровідникових матеріалів та структур. Основні результати роботи повною мірою відображені в 7 публікаціях у фахових виданнях, вони пройшли апробацію на багатьох наукових конференціях. Автореферат дисертації повно та адекватно відображає структуру, зміст та основні висновки роботи.

Вважаю, що за об'ємом, новизною, науковим рівнем та практичною вагомістю отриманих результатів дисертаційна робота "Вплив напруженої гетеромежі на електронні, дифузійні та електричні властивості наногетеросистем" відповідає вимогам МОН України, а її автор, Кулик Надія Ярославівна, заслуговує на присудження наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла.

Провідний науковий співробітник
Інституту фізики напівпровідників
ім. В.С. Лашкарьова
НАН України, доктор фіз.-мат. наук,
професор



Є.Я. Глушко

