ВІДГУК

Офіційного опонента головного наукового співробітника Інституту фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова Національної Академії Наук України доктора фізико-математичних наук професора Корбутяка Дмитра Васильовича на дисертаційне дослідження Гутіва Василя Володимировича «Теорія пренормованого спектру багатозонних квазічастинок взаємодіючих з поляризаційними фононами» на здобуття ступеня доктора філософії в галузі знань 10 - Природничі науки за спеціальністю 104 - Фізика та астрономія

Актуальність теми дослідження.

Технологічний прогрес завжди супроводжувався процесом мініатюризації як фактором, який сприяє зменшенню енерговитрат і матеріалів, а також вирішує складні технічні й екологічні проблеми. Подібним шляхом відбувався і розвиток електроніки на основі класичної фізики, поки просторове зменшення активних елементів наноприладів підійшло до нанорозмірів. Із середини 1980-х років почалося інтенсивне вивчення і створення нанодетекторів, яке досить успішно триває до сьогоднішнього часу. Невдовзі після створення перших квантовоямних інфрачервоних нанофотодетекторів з'явилися квантові каскадні детектори і лазери, які, станом на сьогодні охопили весь актуальний ІЧ-діапазон електромагнітного спектру зі всіма вікнами атмосферної прозорості.

Основою функціонування будь-яких нанодетекторів є їх активні елементи, які мають квантовоямну структуру де, внаслідок просторового квантування, виникає певна кількість електронних підзон. Під дією електромагнітного поля електрони здійснюють міжпідзонні квантові переходи з наступним фононсупровідним тунелюванням по каскаду нанодетектора створюючи робочий струм, який і детектує наявність поля. Причиною фоносупровідного тунелювання електронів є їх суттєва взаємодія з багатьма гілками фононів (обмежених, інтерфейсних, та ін.) притаманних

всім наносистемам через наявність меж, які розділяють квантові ями і бар'єри.

Потрібно відмітити, що за десяток років інтенсивного експериментального дослідження нанодетекторів інфрачервоного діапазону вони стали конкурентноздатними зі своїми масивними аналогами, а в певних інтервалах частот навіть досягли більшої комерційної привабливості. Щодо теорії електронних спектрів у підходах, які не враховували фононні підсистеми, то вона розвивалася на основі моделей електрона з просторово-залежною ефективною масою у каскадах активних елементів з прямокутними або складними потенціальними рельєфами квантових ям і бар'єрів. У більш детальних теоріях, які враховували електрон-фононну взаємодію з основними фононними гілками, перенормовані енергетичні спектри електронів переважно розраховувалися в однофононному наближенні.

Розвиток теорії звичайно сприяв кращому розумінню фізичних явищ і процесів, які відбуваються у каскадах активних областей деяких типів нанодетекторів, що навіть покращувало їх робочі параметри. Однак відсутність повної і послідовної квантової теорії багатозонної системи квазічастинок взаємодіючих з довільною кількістю багатогілкових (модових) фононів не дає можливість досягнути хорошого узгодження теорії з експериментом для всіх типів нанодетекторів. Існують випадки неоднозначного розуміння причин деяких парадоксальних явищ, що відбуваються у функціонуючих наноприладах. Наприклад успішно працюючі квантово каскадні детектори із спотвореними чи навіть не повними (обірваними) «фононними драбинками» в екстракторах каскадів. Хоча з фізичних міркувань можна очікувати, що одним із механізмів, який може заповнити відсутні електронні стани «фононної драбинки», можуть бути сателітні рівні зв'язаних електрон-фононних станів. Однак послідовної квантової теорії, яка б адекватно і однозначно показала існування і належне функціонування таких станів, поки що не існує. Створення такої теорії є хоч і

складним але дуже актуальним завданням, реалізація якого започаткована у цій роботі.

Зв' язок роботи з науковими програмами, планами, темами.

Дисертаційна робота виконана на кафедрі теоретичної фізики та комп'ютерного моделювання Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича відповідно до плану її наукових досліджень за темами «Дослідження спектрів квазічастинок, перенормованих взаємодіями з електромагнітними та квантованими полями в низькорозмірних та 3d системах із метою оптимізації параметрів наноприладів» (номер Держреєстрації 0116U004083) та «Квантова теорія фізичних явищ і процесів у низьковимірних системах різної симетрії як основних елементах сучасних наноприладів» (номер Держреєстрації 0121U109823).

Тему дисертації затверджено рішенням Науково-технічної ради Черівецького національного університету імені Юрія Федьковича (протокол № 13 від 4 листопада 2019 року).

Ступінь обгрунтованості наукових положень, висновків, рекомендацій сформульованих у дисертації, підтверджується застосуванням належних методів дослідження, що дозволило Гутіву В.В. зробити теоретичні висновки й надати практичні рекомендації, які характеризуються науковою новизною й теоретичною обгрунтованістю. Проектуючи структуру дисертаційного дослідження дисертант використав методи квантової механіки та квантової теорії поля.

Дисертаційна робота Гутіва В.В. характеризується послідовним і логічним викладом матеріалу. Вона складається із вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаної літератури та додатків. Робота є самостійною науковою працею.

У вступі обгрунтовано вибір теми дослідження. Переконливо показано актуальність дослідження, сформульована мета, основні задачі, об'єкт та предмет дослідження, вказана наукова новизна і практична цінність

отриманих результатів, подано інформацію про особистий внесок здобувача та апробацію роботи, її структуру та обсяг.

У першому розділі дисертант виконав грунтовний огляд періодичної літератури стосовно нанодетекторів інфрачервоного діапазону. Детально описано послідовний розвиток квантовоямних ІЧ-детекторів та квантових каскадних детекторів. Описано два типи функціонування цих приладів – фотопровідний з прикладеним постійним електричним полем та фотовольтаїчний без поля. Проаналізовано переваги й недоліки обох типів детекторів. Показано як поступово, в основному експериментально, вдосконалювалася конструкція нанодетекторів та оптимізовувалися їх робочі параметри шляхом вибору матеріалів та належного дизайну активних областей. Проаналізовано переваги та недоліки цих наноприладів у всіх піддіапазонах – від ближнього до далекого інфрачервоного.

Аналізуючи інтенсивний розвиток експериментальних досліджень нанодетекторів, дисертант відмітив, що одночасно відбувався і теоретичний супровід, який сприяв розумінню суті фізичних процесів, що відбуваються у наногетеросистемах, однак послідовна квантова теорія яка пояснює деякі важливі експериментальні факти – до цього часу відсутня. Як приклад приведено добре відомий експериментальний факт нормального функціонування квантових каскадних детекторів з неузгодженими чи навіть обірваними «фононними драбинками» екстракторів.

Враховуючи, що із загальнотеоретичних міркувань відома можливість існування зв'язаних станів квазічастинок з фононами, було зроблене припущення, що такі стани відігравати суттєву роль у фононсупровідному транспорті електронів крізь активні елементи нанодетекторів.

У другому розділі дисертант розробляє квантову теорію спектральних параметрів широкосмугового нанофотодетектора PV-типу далекого інфрачервоного діапазону. Цей діапазон викликає не лише суто на науковий інтерес, а й прикладну зацікавленість, так як у ньому знаходиться одне з актуальних вікон атмосферної прозорості. Пропонується квантова теорія

спектральної смуги поглинання електромагнітного поля каскадами активної області детектора з новим дизайном потенціального профілю. Окремий каскад містить одну широку квантову яму без внутрішньої структури і дві групи квантових ям з такими ж величинами глибин і ширин, але з протилежною внутрішньою структурою малих ям і бар'єрів.

Уважаючи, що у відповідності з експериментальними роботами, окремі широкі квантові ями розташовані на достатньо далекій відстані між собою і їх взаємним впливом можна знехтувати, дисертант, на основі моделі просторовозалежної ефективної маси електрона, точно розв'язав стаціонарне рівняння Шредінгера і отримав енергетичний спектр, хвильові функції і сили осциляторів квантових переходів у всіх складових елементах активної області нанодетектора.

Конкретні розрахунки спектральних параметрів каскадів виконувалися на базі широких квантових ям $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ з малими внутрішніми ямами $Ga_yIn_{1-y}As$ та бар'єрами $Al_yGa_{1-y}As$. Вибір сполук диктувався близкістю розмірів їх елементарних комірок, щоб убезпечити каскади від утворення шкідливих напружень, які збільшують негативний темновий струм.

Оптимізація параметрів смуги поглинання широкосмугового нанофотодетектора здійснювалася вибором величин потенціалів (U) і півширин (D) широких квантових ям та потенціалів (±V) і півширин (d) малих внутрішніх ям і бар'єрів.

У підсумку показано, що запропонований дизайн активного елемента зі складним потенціальним рельєфом каскадів на основі добре апробованих матеріалів квантових ям і бар'єрів, належним вибором їх концентрацій (x, y) та варіацією товщин широких квантових ям і малих внутрішніх ям та бар'єрів, забезпечує значні сили осциляторів квантових переходів під дією електромагнітного поля у широкому інтервалі довжин хвиль далекого ІЧ-діапазону, а отже й успішне функціонування широкосмугового нанофотодетектора в актуальному другому вікні атмосферної прозорості.

У третьому розділі розробляється теорія перенормування вироджених і невироджених спектрів багаторівневих квазічастинок взаємодіючих з багатьма одномодовими фононами.

Із обох попередніх розділів дисертації отримується висновок про те, що для створення послідовної квантової теорії електрон-фононної взаємодії у багатошарових наногетероструктурах, як складових елементах нанодетекторів, у реалістичних моделях потрібно вже з «перших кроків» враховувати багатомодові процеси при взаємодії багатозонних (багаторівневих) квазічастинок з багатогілковими (багатомодовими) фононами. Така теорія відсутня через відомі математичні проблеми квантової теорії поля, як це коротко описано у першому параграфі цього розділу. Тому пропонується розв'язувати проблему «аналітичної громіздкості» послідовно: спочатку розробити квантову теорію перенормування спектра багаторівневої квазічастинки взаємодіючої з одномодовим поляризаційним фононом, а потім – однорівневої квазічастинки з багатомодовими фононами.

Перша частина цього підходу реалізується на основі гамільтоніана Фреліха багаторівневої локалізованої квазічастинки взаємодіючої з одномодовим поляризаційним фононом. Застосовується метод діаграмної техніки Фейнмана-Пайнса для запізнюючої функції Гріна квазічастинки при T=0K, що розроблений для однорівневої квазічастинки. Узагальнення цього методу на випадок багаторівневих квазічастинок не зустрічає проблем на етапі формального точного розв'язування системи рівнянь, які зв'язують фур'є-образ матричних елементів функцій Гріна з матричними елементами масового оператора. Складність аналітичного розрахунку масового оператора виникає через необхідність врахування і міжрівневої взаємодії, і багатофонних процесів.

Для розрахунку повного масового оператора у дисертації розроблено метод послідовного парціального підсумовування мультиплікативних діаграм. Детальний аналіз діаграм масового оператора починаючи з двофононного показує, що кожна діаграма містить дві складові –

мультиплікативну і немультиплікативну. Тому спочатку до діаграм усіх порядків, починаючи з другого, застосовується перше виділення мультиплікативних діаграм із немультиплікативних діаграм усіх порядків з наступним їх парціальним підсумовуванням у перенормований масовий оператор першого порядку який в аналітичному вигляді приймає вигляд нескінченного розгалуженого ланцюгового дробу.

Далі виконується щойно описана процедура виділення і парціального підсумовування безмежного ряду мультиплікативних діаграм другого типу, що починається з діаграми другого порядку, яка не увійшла у перенормований масовий оператор першого порядку. Аналогічно перенормовуються масові оператори вищих порядків сума яких і визначає повний масовий оператор.

На основі перших трьох наближень масового оператора з урахуванням багатофононних процесів дисертант детально дослідив властивості перенормованого невиродженого і двічі виродженого спектрів дворівневих і невиродженого спектра трирівневої квазічастинки взаємодіючих з одномодовими поляризаційними фононами.

Вперше отримані такі головні висновки.

Перенормований спектр квазічастинки з двома невиродженими енергетичними рівнями суттєво залежить від того, чи різниця їх енергій близька, чи далека від резонансу з енергією кратною енергії фонона. Міжрівнева взаємодія через фонони викликає розщеплення всіх сателітних рівнів у сателітні зони у міжрезонансних інтервалах енергій і в складні комплекси рівнів у резонансних інтервалах енергій. Зі збільшенням енергетичної відстані між обома головними рівнями кількість рівнів у сателітних зонах і комплексах зростає і вони розширюються.

Цікавою несподіванкою виявилося те, що характер розщеплення рівнів у сателітних зонах і комплексах кардинально різний. Зміна відстані між обома головними рівнями в нерезонансних інтервалах практично не змінює кількості і взаємне розташування рівнів у зонах, а в комплексах навіть

незначна зміна цієї відстані різко змінює не лише положення, а й їх кількість. Отже виявилася нестабільність сателітного спектра в резонансних інтервалах різниць енергій між обома енергетичними рівнями.

Встановлено, що перенормований спектр квазічастинки з двічі виродженим збудженим енергетичним рівнем якісно подібний до щойно описаного, тільки в зонах і в комплексах збільшується кількість розщеплених рівнів, хоча їх розміри практично не змінюються. Ще варто відмітити, що властивості цього спектра ще більше подібні на властивості перенормованого спектра квазічастинки з трьома невиродженими рівнями.

У четвертому розділі дисертації побудована теорія перенормування спектра локалізованої однорівневої квазічастинки взаємодіючої з багатомодовими поляризаційними фононами при кріогенній температурі в моделі Давидова.

У вступі до цього розділу дисертант коротко описав математичні проблеми різних підходів і методів при врахуванні багатофононних процесів у задачах про перенормування спектра квазічастинок багатомодовими фононами. Вказано, що ця задача розв'язувалася Давидовим у простішій моделі методом функцій Гріна за умови, що квазічастинка може перебувати лише у двох станах, а кількість фононних мод довільна. У такій моделі Давидов знайшов точний аналітичний вираз для запізнюючої функції Гріна, а її точний фур'є-образ, а отже й перенормований спектр лише для одномодової системи. Для багатомодової системи перенормований спектр був отриманий лише наближено і не мав коректної поведінки при T прямуючому до 0.

Отже, пов на задача залишалася не розв'язаною аж до теперішнього часу. Як виявилося, і це показано в дисертаційні роботі, точний розв'язок для фур'є-образа функцій Гріна існує і він отриманий із перебудовою безмежних рядів доданків, що еквівалентно парціальному підсумовуванню, яке виконувалося у попередньому розділі.

У результаті вперше був отриманий правильний перенормований спектр локалізованої квазічастинки взаємодіючої з довільною кількістю фононних мод. Крім цього вперше був отриманий точний аналітичний вираз для середнього числа віртуальних фононів у «шубі» перенормованої взаємодією квазічастинки.

На основі загальної теорії дисертант розрахував і детально проаналізував властивості перенормованих спектрів і середніх чисел фононів у основних і сателітних станах одно- дво- і тримодових систем. Виявилося, що всі спектри залишаються дискретними, як і повинно бути з фізичних міркувань, незалежно від кількості фононних мод, від співвідношень між величинами їх енергій, та величин констант зв'язку. Встановлено, що повний спектр (включно із сателітною складовою) є сильно виродженим якщо співвідношення між величинами фононних енергій різних мод є кратним, частково виродженим, якщо воно є раціональним, і не виродженим, коли співвідношення ірраціональне. Всі сателітні стани ведуть себе як фононподібні квазічастинки при будь яких константах зв'язку, а основний стан при збільшенні констант зв'язку послідовно проходить всі три стадії – від квазічастинкової, через гібридний комплекс, аж до фононподібного сильно зв'язаного комплекса з потужною «шубою» віртуальних фононів.

Наукові положення, розроблені особисто дисертантом та їх новизна полягає у тому, що:

- Дисертант запропонував модель основного елемента широкосмугового нанофотодетектора на основі ізотропних сполук квантових ям і бар'єрів зі складним потенціальним профілем. Виконав квантовомеханічний розрахунок спектральних параметрів нанодетектора і показав, що він може успішно працювати в актуальному вікні атмосферної прозорості далекого інфрачервоного діапазону.

- Самостійно виконав комп'ютерний розрахунок перенормованого масового оператора дво- і трирівневої квазічастинок. Вперше виявив нові властивості перенормованого спектра показавши, що в нерезонансному

інтервалі різниць енергій головних рівнів сателітний спектр стабільний, а в резонансному – не стабільний.

- Самостійно виконав комп'ютерний розрахунок і аналіз перенормованих спектрів квазічастинки з дво- і тримодовими фононами в моделі Давидова при Т=0К. Вперше аналітично отримав вирази для середніх чисел віртуальних фононів у квазічастинкових «шубах» та виявив їх властивості.

- Приймав активну участь у обговоренні, постановці та розробці нових підходів і методів розв'язування задач. Виконував аналіз отриманих результатів формуючи обгрунтовані висновки.

Обгрунтованість і достовірність наукових положень, висновків і рекомендацій забезпечена тим, що матеріали дисертації опубліковані у високорейтингових міжнародних журналах, які рецензуються фаховими науковцями. До розв'язання задач застосовувалися сучасні потужні методи теоретичної фізики. Коректність висновків і рекомендацій базуються на аналітичній перевірці точно розв'язаних задач, а розв'язані наближено – перевірені на збіжність і не суперечливість фізичним міркуванням та принципам.

Професійний огляд наукової літератури з усіх тем виконаних задач і рівень їх розв'язання свідчать про те, що дисертант повністю володіє методологією наукової діяльності.

Наукове та практичне значення роботи полягає в тому, що:

- Розроблена квантовомеханічна теорія оптимізації дизайну каскадів активного елемента широкосмугового нанофотодетектора далекого інфрачервоного діапазону на базі ізотропних сполук.

- Для розрахунку перенормованого спектра багаторівневої квазічастинки взаємодіючої з одномодовими фононами розроблений математичний підхід для представлення масового оператора у формі суми парціальних підсумованих доданків мультиплікативних діаграм, які адекватно й послідовно враховують багатофононні процеси.

- Розроблено спосіб розрахунку масового оператора однорівневої квазічастинки взаємодіючої з багатомодовими поляризаційними фононами з ефективним врахуванням багатофононних процесів.

Отже основне наукове значення дисертаційної роботи полягає в тому, що запропоновані обидва підходи відкривають прямий (хоч і не простий) шлях до побудови загальної теорії взаємодії багаторівневих квазічастинок з багатомодовими фононами.

Практичне значення виконаної роботи у тому, що вона може бути корисною при підготовці навчальних посібників і підручників, а також для доповнення спецкурсів з квантової теорії фізичних процесів у наногеторсистемах.

Позитивні результати дисертаційної роботи природньо все таки викликають деякі **зауваження та запитання**.

1. Задача Шредінгера для квазічастинки у другому розділі розв'язувалася за умови, що відстань між сусідніми широкими квантовими ямами така велика, що вони практично не впливають на спектр одна одної. Це, звичайно, значно спростило розв'язання рівняння Шредінгера чому й отрималися точні розв'язки. Однак виникає запитання: чому не варто було залишати розміри міжямних бар'єрів скінченними і варіюючи їх розміри, можливо, ще більше оптимізувати робочі параметри нанодетектора.

2. З аналітичних викладок третього і четвертого розділів дійсно видно, що об'єднуючи розвинені там математичні підходи і не зважаючи на очевидну громіздкість аналітичних та комп'ютерних розрахунків можна побудувати загальну теорію взаємодії багаторівневої квазічастинки з багатомодовими фононами. Тому й виникає запитання: чи не можна здійснити ще більше узагальнення і на цих же засадах побудувати найзагальнішу теорію взаємодії багатозонної квазічастинки з багатозонними фононами.

3. У дисертаційній роботі вивчалася взаємодія квазічастинки з фононами при дуже низьких (кріогенних) температурах, що формально розглядалося як T=0K. Оскільки температура часто дуже сильно впливає на роботу

наноприладів то виникає питання: чи можна врахувати T≠0K у розвиненому математичному апараті. Якщо так, то яких змін у властивостях перенормованих спектрів варто очікувати.

Відсутність порушення академічної доброчесності. Дисертаційне дослідження є самостійною науковою працею автора. Висновки, рекомендації та пропозиції, що характеризують наукову новизну дисертаційного дослідження, одержані автором особисто. При використанні праць інших учених для аргументації окремих положень дослідження обов'язково вказано посилання на відповідні праці.

Загальний висновок

Дисертаційна робота Гутіва Василя Володимировича «Теорія перенормованого спектру багатозонних квазічастинок взаємодіючих з поляризаційними фононами», є актуальною, завершеною і самостійною працею, яка виконана з використанням відповідних методів дослідження, має наукове й практичне значення. Робота відповідає вимогам пунктів 6, 7, 8, 9 «Порядком присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії» затвердженого Постановою Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022р. №44 (із змінами, внесеними згідно з Постановою Кабінету Міністрів України №431 від 21.03.2022 р.), а її автор Гутів Василь Володимирович заслуговує на здобуття ступеня доктора філософії у галузі знань 10 – Природничі науки за спеціальністю 104 – Фізика та астрономія.

Офіційний опонент:

Головний науковий співробітник

Інституту фізики напівпровідників

імені В.Є.Лашкарьова НАН України

проф. Корбутяк Дмитро Васильович

ВІДДІЛ КАДРІВ

ЗАСВІДЧУЮ

Підпис

Зав. відділу кадрів

ІФН ім. В.Є.Лашкарьова

НАН України

30.05.23