

ВІДГУК

офіційного опонента щодо дисертації Щербань Наталії Олексіївни на тему "Контрольована модифікація електрофізичних характеристик кремнієвих мікрочастин легуванням домішками перехідних металів для сенсорної техніки", представленої на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 153 – Мікро- та наносистемна техніка.

1. Актуальність теми дисертації

Сучасний розвиток магнітоелектроніки, який трансформувався у спінтроніку і базується на досягненнях наноелектроніки, викликав широкий спектр досліджень квантово-розмірних ефектів як в новітніх гетероструктурованих наноконструктивних матеріалах, так і в класичних напівпровідникових матеріалах, таких як кремній, германій, що дало можливість реалізувати у них нові властивості. Одним із таких напрямків є дослідження фізичних процесів квантового перенесення носіїв заряду в мікрочастинках кремнію, модифікованими домішками перехідних металів та бору, що лягло в основу вирішення проблеми розбудови нового класу приладів мікро- та наноелектроніки, таких як сенсори температури, сенсори магнітного поля з унікальними характеристиками в широкому діапазоні температур. Тому дослідження в дисертації Щербань Н.О., що направлені на вирішення вищезгаданої проблеми, безумовно, є актуальними.

2. Достовірність та обґрунтованість наукових досліджень та висновків дисертаційної роботи.

Достовірність та обґрунтованість наукових результатів та висновків, що відображені в дисертації Щербань Н.О. забезпечується коректним використанням фізичних та математичних моделей і методичних засобів, що підтверджено результатами експериментальних досліджень.

3. Наукова новизна роботи полягає в тому, що встановлено зв'язок між магнітоопором кристалів та їх спіновою впорядкованістю, а також виявлено кореляцію між поляризаційними ефектами та особливостями змін електрофізичних і магнітних властивостей у значному діапазоні температур, які покладені в основу концепції розроблення та прогнозування властивостей сучасних приладів мікросистемної техніки:

- в результаті експериментальних досліджень температурних залежностей провідності та магнітоопору встановлено, що у легованих бором мікрочастинках кремнію до концентрацій, що відповідають фазовому переходу метал-діелектрик за рахунок додаткового введення магнітної домішки реалізується стрибкоподібний характер провідності за низьких температур до температури 60К, що може бути використано для створення елементів сенсорної техніки, зокрема у високочутливих сенсорах температури;
- результати теоретичних досліджень за допомогою проєкційно-доповнених хвиль (PAW) щодо спінової поляризації суперкомірки на основі кремнію, який легувано домішками бору та нікелю, в рамках вакансійного механізму, чи механізму заміщення вказують на асиметрію густини електронних станів, що притаманна електронній системі і проявляється у відмінному від нуля

- магнітному моменті суперкомірки.
- визначено, що максимальний магнітний момент для суперкомірки $\text{Si}_{61}\text{B}_1\text{Ni}_1$, яка реалізована за вакансійним механізмом, становить $1,16\mu\text{B}$. Ці результати використано для прогнозування характеристик високочутливих сенсорів магнітного поля з магніторезистивним принципом дії.
 - за результатами експериментальних досліджень магнітоопору кристалів $\text{Si}(\text{B},\text{Ni})$ з концентрацією носіїв заряду, що відповідає переходу метал-діелектрик, в інтервалі криогенних температур для оцінки параметрів приповерхневої провідності визначено довжину фазової когерентності $l\phi$ та спін-орбітальної когерентності l_{so} , які становлять приблизно 45 нм та 750 нм відповідно для $4,2\text{ К}$ і експоненціально зменшуються зі зростанням температури.
 - експериментально встановлено для кристалів $\text{Si}(\text{B},\text{Ni})$ гістерезис намагніченості для температури скрапленого гелію, що свідчить про наявність магнітного моменту в кристалах. За результатами теоретичних досліджень за допомогою проекційно-доповнених хвиль та дослідження намагніченості визначено концентрацію магнітних домішок, яка становить $4 \times 10^{17}\text{ см}^{-3}$.

4. Практичне значення одержаних результатів.

Практичне значення одержаних результатів роботи полягає у тому, що результати досліджень використано для створення елементів сенсорної техніки, а також багатофункційних приладів, що здатні суміщати в собі вимірювання кількох фізичних величин:

1. На основі сильнолегованих ниткоподібних мікрокристалів кремнію, модифікованих домішкою нікеля, розроблено сенсор магнітного поля з чутливістю $18\% \cdot \text{Тл}^{-1}$ за температури $4,2\text{ К}$. Працездатність роботи чутливого елемента сенсора забезпечується значним магнеторезистивним ефектом, який відображається в залежності магнітоопору від індукції магнітного поля, сягаючи 253% при 14 Тл за гелієвих температур.
2. Використовуючи леговані мікрокристали кремнію, розроблено сенсори теплових величин в інтервалі $4,2\text{--}50\text{ К}$: для розроблення високочутливих сенсорів температури з терморезистивним принципом дії, або височутливих термореле, слід використовувати мікрокристали $\text{Si}(\text{B},\text{Ni})$ з питомим опором $\rho_{300\text{К}} = 0,025\text{ Ом}\cdot\text{см}$, що відповідає діелектричній області переходу метал-діелектрик. Відносна зміна опору кристалів відрізняється на декілька порядків за температур скрапленого гелію ($4,2\text{ К}$). Температурний коефіцієнт опору таких зразків сягає $300\% \cdot \text{К}^{-1}$. Для терморезистивних сенсорів, створених на основі кристалів з питомим опором $\rho_{300\text{К}} = 0,007\text{ Ом}\cdot\text{см}$, працездатних за впливу дестабілізуючих чинників, зокрема магнітного поля, температурний коефіцієнт опору становить $\text{ТКО} = 0,011\% \cdot \text{К}^{-1}$.
3. Запропоновано використання чутливого елемента на основі ниткоподібного кремнію, що модифікований домішками бору та нікелю, для яких рівень легування відповідає безпосередній близькості до фазового переходу метал-діелектрик, як чутливого елемента деформації, для якого коефіцієнт тензочутливості в області гелієвих температур досягає значення $K_{4,2\text{К}} = 165$ при деформації стиску $\epsilon = -5,29 \times 10^{-3}$ відн. од.

Новизну практичних розробок захищено патентом України.

5. Структура та зміст дисертації.

Дисертація містить вступ, чотири розділи, висновки, список використаних джерел, що налічує 170 бібліографічних найменувань. Роботу викладено на 160 сторінках, що містить 86 рисунків та 7 таблиць.

Зміст дисертації належним чином відображає мету роботи, основні завдання, проведено теоретичні та експериментальні дослідження та отримано науково-технічні результати прикладного характеру.

У вступі подано всі необхідні дані щодо актуальності поставлених в дисертації задач, чітко подано мету і задачі дослідження та дані про наукову новизну і практичну цінність отриманих результатів, а також особистий вклад здобувача в отриманні результатів. Наведено дані щодо апробації роботи та її зв'язок з науковими програмами, темами, планами.

У першому розділі наведено стан проблеми щодо розроблення пристроїв сучасної спінтроніки на основі напівметалів та напівпровідників для розуміння принципів роботи пристроїв, в основі роботи яких лежить поляризаційні процеси. Подано відомості щодо елементів функціональної магнітоелектроніки на основі напівпровідникових гетероструктур, в т.ч. особливостей роботи магніторезистивної оперативної пам'яті (MRAM). Своєю чергою дослідження характеристик приладів на основі розбавлених магнетиками ниткоподібних напівпровідникових кристалів (DMS), завдяки природно утвореній гетероструктурі, відкривають можливості виготовлення надшвидких, мініатюрних, з низьким енергоспоживанням елементів сенсорної техніки.

У другому розділі представлено технологічні аспекти створення легованих мікрокристалів кремнію, методика та засоби дослідження. Виходячи з аналізу технології вирощування легованих мікрокристалів Si (B,Ni), визначено параметри процесу росту для одержання ниткоподібних кристалів р-типу провідності з концентрацією донорної домішки, яка відповідає значенням концентрації в околі переходу метал-діелектрик, для дослідження їх електрофізичних, терморезистивних і магнітних властивостей в широкому інтервалі температур під дією деформування та магнітного поля. Для аналізу електронної системи кристалів Si (B, Ni) та отримання додаткової інформації про внутрішню структуру зразків описано методику розрахунку за допомогою програмно-апаратного комплексу АВІНТ та оцінку параметрів електронної підсистеми кристалів методом порівняльного аналізу наборів даних PAW.

У третьому розділі проведено аналіз та розрахунки електронної структури легованих кристалів Si(B,T), де $T = \{Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni\}$ – перехідні 3d елементи, що оцінювалася за допомогою проекційно доповнених хвиль (PAW). Підхід PAW поєднує в собі особливості псевдопотенціального та повністю електронного методу розширених плоских хвиль. Розрахунки електронної структури кристала кремнію, легованого атомами B і Ni, отримані з використанням гібридного обмінно-кореляційного функціоналу PBE0 на основі одночастинкового базису функцій PAW показали, що додавання бору в кремній, легований нікелем, приводить до значного звуження ширини забороненої зони. Результати досліджень електронного енергетичного спектру кристалів на основі кремнію для різних домішок перехідних металів показали, що для електронної DOS притаманна

асиметрія, що вказує на відмінний від нуля магнітний момент у суперкомірці. Інтервал магнітного моменту лежить у межах від найменшого $0,002\mu_B$ для Co до $3,45\mu_B$ для марганцю Mn. Виявлено, що внаслідок легування домішкою бору та нікелю за вакансійним механізмом магнітний момент суперкомірки на основі кремнію становить $1,1\mu_B$.

У четвертому розділі представлено результати експериментальних досліджень мікрокристалів кремнію, легованих домішкою бору та модифікованих домішкою перехідного металу нікелю в широкому інтервалі температур (4,2- 300 K) та магнітних полів (0-14 Тл). Розроблено та запропоновано прилади і пристрої мікросистемної техніки. Виявлено, що для розроблення високочутливих сенсорів температури з терморезистивним принципом дії, або високочутливих термореле, слід використовувати мікрокристали Si(B,Ni) з питомим опором $\rho_{300K} = 0.025 \text{ Ом}\cdot\text{см}$, що відповідає діелектричній області переходу метал-діелектрик. Відносна зміна опору кристалів змінюється на декілька порядків за температур скрапленого гелію (4,2 K). Температурний коефіцієнт опору таких зразків сягає $300\% \cdot K^{-1}$. Окрім того, встановлено, що зразки з питомим опором $\rho_{300K} = 0.007 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ з концентрацією носіїв заряду $N_B \approx 1 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$, що відповідає металевій стороні ПМД придатні для використання в терморезистивних сенсорах. Температурний коефіцієнт опору таких зразків становить $\text{TKO} = 0.011\% \cdot K^{-1}$. Для температур зрідженого гелію максимальний магнітоопір досягає не більше 4% у магнітних полях з індукцією до 14Тл. Встановлено, що незважаючи на слабку чутливість стійкості до температури в широкому діапазоні температур, продуктивність терморезистивних датчиків визначається лінійністю характеристик і стійкістю термоелементів до впливу зовнішніх дестабілізуючих факторів. Дослідження магнітоопору кристалів НК Si(B,Ni) за впливу деформації на магнітоелектричні характеристики кристалів дозволили спрогнозувати використання мікрокристалів кремнію, що леговані домішкою бору до концентрації, яка відповідає переходу метал-діелектрик та магнітною домішкою у багатофункційних сенсорах магнітного поля-деформації. Так для мікрокристалів Si (B,Ni) коефіцієнт тензочутливості в інтервалі температур 4,2- 100K сягає 165 за деформації $\epsilon = -5.29 \times 10^{-3}$ і практично не залежить від температури, в той же час для магнітної складової сенсора доцільно використовувати кристали Si (B,Ni) з концентрацією носіїв заряду $5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ і відповідає безпосередньо переходу метал-діелектрик. Принцип роботи такого чутливого елемента базується на значному магнеторезистивному ефекті, який відображається в залежності магнітоопору від індукції магнітного поля, сягаючи 253% при 14 Тл за гелієвих температур.

6. Повнота висвітлення результатів у наукових працях і особистий внесок здобувача.

Основні результати за напрямком роботи опубліковано в 11 наукових працях, із них у статтях провідних наукових журналах України та за кордоном – 5 (1 стаття у виданнях науково-метричної бази даних Scopus/WoS, яка опублікована в журналі з імпаکت-фактором, що входять до ISI Master Journal List 1-го квартилю, 3 статті у закордонних журналах науково-метричної бази даних Scopus/WoS та 1 стаття у фаховому журналі України, що індексується НМБД Scopus/WoS), 5 публікацій у матеріалах конференцій (1 з яких входять до видань, що індексовані науково-метричною базою даних Scopus), 1 патент України.

7. Загальні зауваження.

- 1) У розділі 4 наведено дані щодо залежності коефіцієнта тензочутливості у широкому інтервалі температур (розділ 4, рис.4.3. вставка) на основі мікрокристалів Si (B,Ni), що важливо з точки зору розроблення сенсорів деформації, працездатних в складних умовах експлуатації. Однак, запропоновані пристрої, які розроблені в роботі, а також їх вихідні характеристики обмежуються сенсорами температури, або магнітного поля. Можливо, доцільно було б більш детально висвітлити розроблення сенсорів механічних величин.
- 2) В роботі (розділ 4) не достатньо висвітлено чинники, які впливають на стабільність роботи розроблених і виготовлених мікроелектронних сенсорів, зокрема магнітного поля.
- 3) В дисертації (розділ 1) достатньо широко описується принцип роботи магніто-резистивної MRAM пам'яті, в яких реалізована спінова поляризація носіїв заряду, а відтак і запис чи зчитування інформації з комірки. Однак, у практичному значенні висновках тощо відсутні відомості щодо розроблення подібних пристроїв. Варто було б обґрунтувати номенклатуру сенсорів запропонованих у роботі.
- 4) У роботі зустрічаються невдалі стилістичні звороти, описки тощо.

8. Висновок.

Виходячи з критичного розгляду дисертації та зауважень до неї, вважаю, що зауваження не стосуються її принципових положень. Дисертаційна робота Щербань Н.О. є завершеною науковою працею, яка відповідає паспорту спеціальності 153 – Мікро- та наносистемна техніка.

Вважаю, що у представленій роботі отримано нові науково обґрунтовані теоретичні і експериментальні результати та практичні рішення, що в сукупності вирішують актуальну задачу створення елементів сенсорної техніки на основі мікрокристалів кремнію. Робота має практичне значення в галузі виготовлення напівпровідникових приладів. Назва дисертації відповідає змістові виконаних досліджень. Дисертація відповідає вимогам МОН України щодо дисертаційних робіт, а її автор, Щербань Наталія Олексіївна, заслуговує присудження наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 153 – Мікро- та наносистемна техніка.

Професор кафедри біофізики
Львівського національного
медичного університету
імені Данила Галицького
доктор технічних наук, професор



Марія ВІСЬТАК

Підпис _____

Засвідчую _____

Провідний фахівець
відділу кадрів
ЛМНУ ім. Данила Галицького