



Х УКРАЇНСЬКА НАУКОВА КОНФЕРЕНЦІЯ З ФІЗИКИ НАПІВПРОВІДНИКІВ УНКФН–10

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ



Національна академія наук України
Міністерство освіти та науки України
Наукова рада з проблеми «Фізика напівпровідників
і діелектриків» при Відділенні фізики і астрономії
Національної академії наук України
Українське фізичне товариство
Академія наук вищої школи України
Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України
Ужгородський національний університет
Інститут електронної фізики НАН України

*Конференція присвячена 100-річчю
з дня народження проф. П.І. Баранського і
75-річчю з дня заснування фізико-математичного факультету УжНУ.*

**X УКРАЇНСЬКА НАУКОВА
КОНФЕРЕНЦІЯ З ФІЗИКИ
НАПІВПРОВІДНИКІВ
УНКФН–10**

**X UKRAINIAN SCIENTIFIC
CONFERENCE ON PHYSICS
OF SEMICONDUCTORS
(USCPS-10)**

**ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ
ABSTRACTS**

**Ужгород, Україна
26 - 30 травня 2025**

**Uzhhorod, Ukraine
May 26-30, 2025**

УДК 537.311.322

Д 37

10-та Українська наукова конференція з фізики напівпровідників. Матеріали конференції. – Ужгород : ТОВ "РІК-У", 2025. – 452 с.

Дана збірка містить тези доповідей 10-ї Української наукової конференції з фізики напівпровідників (УНКФН-10) за участі зарубіжних науковців. Матеріали відображають зміст доповідей конференції, у яких викладені нові результати, стан і перспективи досліджень в області фізики напівпровідників за основними напрямками: нові фізичні явища в об'ємі та на поверхні напівпровідників, фізичні явища у низькорозмірних структурах, фізика напівпровідникових приладів, проблемні питання мікро- та наноелектроніки, сучасні фізико-технічні аспекти напівпровідникової сенсорики та оптоелектроніки, надвисокочастотна та терагерцова електроніка, матеріалознавство, технології та діагностика напівпровідникових матеріалів.

У збірці надруковані тези пленарних, запрошених, усних та стендових секційних доповідей. Більша частина відповідних повних доповідей за рекомендацією програмного комітету і редакційної колегії конференції буде опублікована в тематичних випусках наукових журналів: "Український фізичний журнал", "Журнал фізичних досліджень", "Semiconductor Physics Quantum Electronics & Optoelectronics", "Функціональні матеріали", "Технология и конструирование в электронной аппаратуре", "Фотоелектроніка", "Сенсорна електроніка і мікросистемні технології".

УДК 537.311.322

Видання тез доповідей здійснено з авторських оригіналів, підготовлених до друку Програмним комітетом і редакційною колегією конференції.

Рекомендовано до друку Вченою радою Інституту фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова НАН України (протокол № 9 від 14 травня 2025 р.).

Редакційна колегія:

Головний редактор О.Є. Беляєв

Члени редколегії: В.О. Кочелап

О.В. Стронський

С.М. Левицький

Р.А. Редько

В.І. Смоланка

В.М. Міца

ISBN 978-617-8390-92-1

© ТОВ "РІК-У"

© Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України
Ужгородський національний університет, 2025

МОДЕЛЬНІ ФОНОННІ СПЕКТРИ КРИСТАЛІВ З СТРУКТУРОЮ A15

І.І.Небола, А.В.Корнейчук, А.Ф.Катаниця, Д.І.Кайнц, І.М.Шкирта, О.О. Спесивих
Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54
Україна, e-mail: ivan.nebola@uzhnu.edu.ua

Характерною особливістю кристалічної структури сімейства кристалів з структурою A15_c, яка охоплює клас найбільш практично вживаних надпровідників A₃B (серед них (A-Nb, B-Sn, Al, Ge, C)) дозволяє розглядати її, як зручний об'єкт для проведення модельних розрахунків фононних спектрів в еквідистантному наближенні по скільки тотожні дистанційні пари однойменних атомів реалізуються, вперше тільки на віддальх кратних параметру елементарної комірки. Тому таке логічне наближення дозволяє перейти до опису сукупності силових констант, які визначається тільки міжатомною віддаллю (еквідистантне наближення в розрахунку модельних фононних спектрів складних кристалів) [1,2] і не залежати від сорту взаємодіючих атомів. Виходя із результатів роботи [3] приведемо модельний розрахунок фононних залежностей і густин станів кристалів з структурою A15. Опишемо мотив елементарної комірки, як масово модульовану структуру [4]. Тоді реальна структура розглядається, як природна масово модульована надгратка з параметрам (4ах4ах4а) на метриці протокристалу (ахаха), (простої кубічної ґратки) ПКГ. Мотив елементарної комірки може бути описаний з використанням (3+3) базису Композиційні особливості реалізації складних кристалів та систем за механізмом заповнення позицій, вакансіями та атомами різного сорту в трансляційно еквівалентних позицій, заданих базисом протокристалу, охоплюються концепцією надпросторової симетрії [1-4]. Дисперсійні криві фононного спектра складних кристалів при цьому визначаються, як розв'язки матричного рівняння:

$$|A - \omega^2 B| = 0, \quad (1)$$

де A-матриця сформована з фур'є компонент динамічних матриць одноатомного протокристалу, яка описує силове поле взаємодій. Матриця B сформована подібним чином з амплітуд масових модуляційних функцій [4] і визначає поле масових характеристик кристалу. Динамічні матриці одноатомного протокристалу $D_{\alpha\beta}(k + q_i)$ визначаються із співвідношення

$$D_{\beta\gamma}^l(k + q_i) = \sum_{(l \neq 0)} \alpha_{\beta\gamma}^l \frac{l_\beta l_\gamma}{l^2} (1 - e^{i(k+q_i)l}) \quad (2)$$

де $\alpha_{\beta\gamma}^n$ матриця силових постійних взаємодії атомів в 0 – й і l – й позиціях, l_β, l_γ - проекції вектора l на осі β, γ .

Відміти, при цьому різницю комбінацій заповнення орбіт, метрики протокристалу, атомами і вакансіями в залежності від вибору локалізації початку відліку в різних 64 позиціях протокристалу.

Реалізація опису реальних кристалічних структур шляхом вибору (3+d) - мірних базисів [1-4] дозволяє ввести в опис сукупність векторів модуляції, яка охоплює заповнення позицій ПКГ структур для (sa×sa×sa)–надґраток. Такий опис кристалічних утворень кубічної сингонії з (sa×sa×sa)–надґратками

закладений в (3+d)- мірних базисах. Сукупність векторів модуляції q_i для (4a×4a×4a)-надграткою містить 64 вектори модуляції.

Мотив структури дозволяє визначити 15 початків відліку для формування орбіт, які задають не нульові динамічні матриці протокристалу. Зауважимо, що реалізація любого мотиву реального кристалу здійснюється шляхом заповнення конкретних позицій надгратки m_j . Розв'язок системи рівнянь (5) дозволяє визначити функції розподілу маси, які задається у вигляді суперпозиції модуляційних функцій

$$: m(r_k, \tau_l) = \sum_{j=1}^8 \rho(q_j, b_j^*) \exp\{i(q_j r_k + b_j^* \tau_l)\}. \quad (3)$$

для компактності запису введемо позначення $\rho_j = \rho(q_j, b_j^*) = \rho(q_j) = \rho_j$
 $m_j = m(q_j, b_j^*) = m(q_j) = m_j$

Розв'язки (3) (для любого фіксованого значення τ) задають, амплітуди масових модуляційних функцій $\rho(q_i) = \rho_i$, які дозволяють сформуувати матрицю дефекту мас В.

Узагальнена динамічна матриця А пов'язана з визначеними Фур'є компонентами динамічних матриць одноатомного протокристалу, згідно рівняння анологічного рівнянню (5) відносно компонент $D_{\beta\gamma}^l(k + q_i)$. Відмітимо, що по компонентні розв'язки для $\rho(D_{\beta\gamma}^p(k + q_i), (q_i - q_j))$ аналогічні (6). Сформована матриця А приймає вигляд:

$$A = \rho(D_{\beta\gamma}^p(k + q_i), (q_i - q_j)) = \rho(D_{(q_i - q_j)}(k + q_j)) = D_{(q_i - q_j)}(k, q_j).$$

Для компактності запису введені позначення $D_{(q_i - q_j)}(k, q_j) = D_{q_1}(k, q_1)$. Відмітимо, що залежність від $(k + q_j)$ приводить до набору 64 динамічних матриць $D_{(q_i - q_j)}(k, q_j)$, та наголосимо, що існує відмінність у виразах матриць типу $D_{q_5}(k, q_8)$, $D_{q_6}(k, q_8)$ та $D_{q_7}(k, q_8)$, в залежності від вибору локалізацій початку відліку а одже різного заповнення позицій орбіт. Для розрахунку власних значень системи (1) розроблено програмне забезпечення в середовищі Maple [5] і проведено модельні розрахунки дисперсії фононів і густини станів кристалів з структурою A15. Розраховані модельні фононні спектри і густини станів задовільно корелює з даними [6] ..

1. [De Wolff](#) P. M., [Janssen](#) T., [Janner](#) A.. (1981). *Acta Cryst.* **A37**,. 625-636
2. Janner A. and Janssen T. (1977)..*Phys. Rev.* **B 15**, 643 – 658.
3. Janssen T., (1979). *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **12**, 24. 5381–5392.
4. Nebola I.I., Katanytsia A.F., Shteyfan A.Ya., Shkyrta I.M., Studenyak I.P., Timko M., Kopčanský P.. (2020). *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*. **23**, 366-371.
5. <https://maple.cloud/app/5753562177994752/Modeling+of+dispersions+of+phonon+spectra>.
6. Tütüncü H. M., Srivastava G. P, Bağcı S., and. Duman1 Fen-Edebiyat S. (2006) *PHYSICAL REVIEW B* **74**, 212506 .



МУКАЧІВСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

89600, м. Мукачево, вул. Ужгородська, 26

тел./факс +380-3131-21109

Веб-сайт університету: www.msu.edu.ua

E-mail: info@msu.edu.ua, pr@mail.msu.edu.ua

Веб-сайт Інституційного репозитарію Наукової бібліотеки МДУ: <http://dspace.msu.edu.ua:8080>

Веб-сайт Наукової бібліотеки МДУ: <http://msu.edu.ua/library/>