

РЕЦЕНЗИЯ

на дисертационния труд на Анди Хамим Зайдан на тема
„Тънки халкогенидни слоеве за оптоелектрониката”
за получаване на образователна и научна степен „доктор”
по научна специалност 5.6. Материали и материалознание
(Технология на полупроводниковите материали и електронните елементи)
от доц. д-р Елена Петрова Кашчиева, катедра „Физика”, ХТМУ, София

1. Биографични данни за дисертанта.

Анди Хамим Зайдан е индонезийски гражданин. Роден е на 22.04.1983 г. в гр. Можокерто, Индонезия. Завършва специалност „Физика” в Бандунгски технологичен институт, гр. Бандунг, Индонезия. Първоначално, през 2005 г., получава бакалавърска степен, като през периода 2003 - 2005 г. е стипендиант по DAAD в Германия. Завършва магистратура по физика като стипендиант на Бандунгски технологичен институт през 2007 г. Междувременно от 2004 до 2006 г. работи в същия институт като асистент по Обща и Квантова физика (2004 г.), Компютърна физика и Термодинамика (2005 г.) и Модерна и Експериментална физика (2006 г.). В този период Анди Зайдан участва в експериментални научни изследвания с фундаментален и приложен характер, а също и в редица разработки по компютърно моделиране на наноструктурни материали и процеси в тях. Отражение на неговата активна дейност са участията му в 8 национални (2007 г. - 2 броя; 2008 г. – 2 броя; 2009 г. – 4 броя) и 2 международни (2009 г. – 2 броя) конференции, а също и в 3 публикации в специализирани списания (2007 г. – 1 брой; 2009 г. – 2 броя). Натрупаният по това време професионален опит е сериозна основа за понататъшните му научни изследвания.

От 01.09.2010 г. Анди Зайдан е зачислен за редовна платена докторантура по Европейска образователна програма Еразмус – Мундос в катедра „Физика” на ХТМУ, София с научен ръководител проф. д-р Пламен Петков (Заповед на Ректора на ХТМУ № Р-ФХ-257/04.10.2010 г.). Явил се е и е издържал отлично изпити по: широкопрофилна дисциплина „Стъклообразни полупроводници”; специализираща дисциплина „Физика на тънките слоеве: синтез, структура и свойства”; научна специалност „Технология на полупроводниковите материали и електронните елементи”; английски език. Дисертантът е отчислен е с право на защита от 01.03.2013 г. със Заповед на Ректора на ХТМУ № Р-ФХ-155/15.03.2013 г.

2. Преглед на дисертационни труд и анализ на резултатите.

Дисертационният труд на А. Зайдан е на тема „Тънки халкогенидни слоеве за оптоелектрониката” е обсъден и приет за защита на заседание на разширен научен съвет в катедра „Физика”, състояло се на 18.06.2013 г.

Темата на дисертацията е актуална и е свързана с едно от основните научни направления, по които се работи активно в катедрата през последните десетилетия. Получаването, изследването и приложението на обемни и тънкослойни халкогенидни материали заема важно място в съвременното материалознание. Конкретен обект на изследване в дисертацията са образци от системата Ge-Te-In.

Дисертацията е написана на 200 страници, съдържа 81 фигури и 14 таблици. Основният текст от 169 страници обхваща 11 глави, разпределени в традиционните четири раздела: въведение (1 глава), теоретична част (2 глави), експериментални методи (2 глави) и резултати и дискусия (5 глави). В последната 11 глава са формулирани приносите на разработката и е направена дискусия по всяка от насоките на изследванията на стъкла от системата Ge-Te-In: моделиране на структурата чрез *Ab initio* Молекулярна Динамика, физикохимично характеризирание на Ge-Te-In обемни образци, кинетика на изпарение и оптични свойства на Ge-Te-In тънки слоеве. Посочени са и насоките за бъдеща работа.

Накрая на основния текст е представен списък на цитираната литература, който съдържа 126 източника. Останалите 31 страници от дисертацията са обособени под формата на 6 приложения, в които са включени и 22 от фигурите. Три от приложенията могат да се причислят към теоретичната част на работата, 2 – съдържат експериментални данни, свързани с близкия порядък и с фото- и термоиндуцирани спектри на пропускане на изследваните образци и в едно от приложенията е представен списък на включените в дисертацията публикации и участия в конференции на А. Зайдан.

Във въведението са посочени мотивацията, начинът на подреждане на дисертацията и целта, чиято формулировка се припокрива със заглавието на дисертацията, но се свързва конкретно за стъкла от системата Ge-Te-In.

Теоретичната част обхваща обширна информация за халкогенидните стъкла и подходите при моделиране на структурата им, която може да се резюмира като: исторически преглед и съвременни тенденции при получаването, изследването и свойствата на този клас материали; стъкла от системата Ge-Te; топология на аморфната мрежа; литературни данни за симулационни експерименти с помощта на

Молекулярна Механика (ММ); Молекулярна Динамика (МД) – основни идеи и статистика; Ab initio Молекулярна Динамика (АВМД); елементи от квантовата механика, използвани като теоретична база за моделиране на структурата на аморфни материали.

Разгледаните експериментални методи включват синтез на обемни образци от бинарната и тройната системи (Ge-Te и Ge-Te-In), а също и теоретичните основи и апаратурата за вакуумно-термично отлагане на тънки слоеве. Като методи за характеризирание на аморфните материали са разгледани рентгено-дифракционен анализ (XRD), трансмисионна (TEM) и сканираща електронна микроскопия (SEM), енергийно дисперсионен рентгенов анализ (EDS). диференциално-сканираща калориметрия (DSC), термогравиметричен анализ (TGA), както и приложените подходи при анализ на оптичните свойства и изчисляване на дебелината на слоевете и оптичните им константи.

Основните резултати от изследванията, върху които е проведена и дискуссия, обхващат следните насоки:

- По метода на Ab initio Молекулярна Динамика са проведени компютърни симулации за изследване на структурата на обемни аморфни образци от системата Ge-Te-In със състави $(\text{GeTe}_4)_{100-x}\text{In}_x$ и $(\text{GeTe}_5)_{100-x}\text{In}_x$. С помощта на същия симулационен метод е проследена склонността към кристализация и е предложен механизъм за протичането ѝ в обемните образци.

- В евакуирани кварцови ампули чрез бързо охлаждане са получени обемни образци със състави $(\text{GeTe}_4)_{100-x}\text{In}_x$ и $(\text{GeTe}_5)_{100-x}\text{In}_x$ ($x=0,5,10,15,20$ мол%), чиято аморфна структура е доказана с XRD анализ. Получени са експериментални данни за плътността (ρ), изчислени са стойности на средното координационно число (Z) и са определени моларния обем (V_m) и компактността (δ) на синтезираните образци, като са проследени зависимостите на плътността и компактността от средното координационно число. Стабилността и стъклообразуващата способност са оценени чрез броя на ограничения за атом, броя на несдвоените електрони и средната енергия на връзките.

- Проследена е кинетиката на изпарение на стъкла от системата Ge-Te-In при едновременни измервания с DSC и TGA.

- Получени са спектрите на пропускане на $(\text{GeTe}_4)_{100-x}\text{In}_x$ и $(\text{GeTe}_5)_{100-x}\text{In}_x$ тънки слоеве и е определена оптичната ширина на забранената зона. Изследвани са фотоиндуцираните изменения в тънките слоеве и възможностите за тяхното приложение в оптоелектрониката.

3. Оценка на съответствието между автореферата и дисертацията.

При сравняване на автореферата и дисертационната работа установих добро съответствие между тях. Основните данни от моделните и лабораторни експерименти, получените от тях резултати и направената дискусия са включени в автореферата. По този начин той представя в подходящ съкратен вид цялостната разработка по темата на дисертацията.

4. Характеристика и оценка на приносите на дисертационния труд.

По мое мнение, без да подценявам значението на експерименталните изследвания, основните приноси на дисертацията са свързани с компютърното моделиране на структурата и кристализационното поведение на подбрани състави от системата Ge-Te-In.

- За първи път чрез Ab initio Молекулна Динамика са получени функциите на радиално разпределение на атомите (RDFs) за състави $(\text{GeTe}_4)_{100-x}\text{In}_x$ и $(\text{GeTe}_5)_{100-x}\text{In}_x$. Разпределението на ъглите между връзките показва, че Te и Ge атоми са разположени перпендикулярно или в една равнина, структурата е четворно координирана, добавянето на In стимулира формиране на тетраедрична структура, Ge атоми участват в както в тетраедрични (Ge-Ge и Ge-In връзки), така и в октаедрични структури (Ge-Te връзка).

- Моделното разпределение на валентните ъгли показва, че структурата на $(\text{GeTe}_4)_{100-x}\text{In}_x$ е изградена от четворно координирани пръстени от вида ABAB (A=Ge,In; B=Te), ускоряващи кристализацията в аморфните състави $(\text{GeTe}_4)_{100-x}\text{In}_x$ и $(\text{GeTe}_5)_{100-x}\text{In}_x$, което е предпоставка за приложението им като материали за фазови превключватели.

- Резултатите от моделиране на плътността на състоянията доказват, че в съответствие с експерименталните резултати, ширината на забранената зона на бинарните състави GeTe_4 и GeTe_5 намалява с увеличаване на съдържанието на In, поради появилите се от добавката на In примесни нива.

- При моделиране на кристализационното поведение чрез проследяване на изменението във времето на тетраедрично координираните структури при охлаждане за 400 ps се доказва, че кристалната фракция в системата GeTe_4 рязко нараства след 200–250 ps, а в системата $(\text{GeTe}_4)_{100-x}\text{In}_x$ - след 250 ps.

- Установено е, че плътността на обемни халкогенидни стъкла от системата Ge-Te-In намалява при състави с по-високо съдържанието на In, в които броят на ограниченията за атом и средната енергия на връзките нарастват.

- Потвърдено е, че съгласно възприетите критерии за броя на несдвоените електрони при тройни халкогенидни системи, съставите $(\text{GeTe}_4)_{100-x}\text{In}_x$ и $(\text{GeTe}_5)_{100-x}\text{In}_x$ имат добра склонност към стъклообразуване.

- Чрез DSC и TGA е доказано е, че температурата на топене за всички образци е под 650 K. На базата на средната енергия на връзките е установено, че съставите $(\text{GeTe}_4)_{100-x}\text{In}_x$ са по-стабилни термично от $(\text{GeTe}_5)_{100-x}\text{In}_x$.

- Установено е, че синтезираните тънки слоеве са непрозрачни във видимата и прозрачни в инфрачервената област на спектъра, а оптичната ширина на забранената зона в тях е по-малка от тази в системата Ge-Te, което се обяснява с разкъсване на връзките Ge-Ge и Te-Te в слоевете и създаване на локализирани състояния в зоната, които намаляват ширината ѝ.

- Дискутирани са потенциалните възможности за приложение на тънките слоеве от системата Ge-Te-In в инфрачервената оптика.

5. Мнение за публикациите по темата на дисертацията.

По темата на дисертацията А. Зайдан е представил убедителна научна продукция - 3 публикации в специализирани научни списания (1 - под печат), 5 отпечатани доклада на международни конференции и 7 постерни съобщение, от които 5 са представени у нас и 2 - в чужбина. Всички посочени материали са в съавторство с български изследователи, като само в един от докладите на конференция има чуждестранен съавтор. В трите публикации и в три от докладите А. Зайдан е водещ автор. Имам преки впечатления от неговия съществен личен принос при провеждане на симулационните и лабораторни експерименти.

6. Критични бележки и коментари.

Впечатлението ми от дисертацията на А. Зайдан е много добро. Тя поставя сериозно начало на моделните изследвания на халогенидни стъкла в катедрата и открива път за много нови разработки. По мое мнение обаче разделът със симулационните експерименти е по-логично да не бъде в началото на експерименталната част, а да следва след получаването и изследването на обемните и тънкослойни материали. Освен това намирам, че в изложението не са разграничени ясно собствените резултати от тези, публикувани в научната литература от други автори.

Основната ми забележка към дисертацията се отнася до твърде големия ѝ обем и усложненото ѝ подреждане с много информация, включена в приложенията. По мое мнение, както теоретичната, така и експерименталната част, могат да се съкратят. Това се отнася специално за информацията от областта на квантовата физика, която е ползвана при моделирането и която може само да бъде цитирана. Излишно е и включването на описанието на TEM и енергийно дисперсионния рентгенов анализ (EDS). EDS методът изобщо не е използван от докторанта, а представените TEM анализи (стр. 115, фиг. 7.2.) на обемните образци представляват всъщност SEM микрофотографии, получени в режим на вторични електрони (SE) при ускоряващо напрежение 30 kV.

Към дисертанта имам следните въпроси:

1. Може ли да се счита, че включеният брой атоми (100 – 300 атома) при използвания симулационен метод (Ab initio Молекулна Динамика) е достатъчен за получаване на достоверна информация и доколко приложените високи скорости на охлаждане имат отношение към реалните експериментални условия за получаване на аморфни образци от системата Ge-Te-In?

2. Имате ли информация за експериментално получени функции на радиално разпределение на атомите на аморфни материали от системата Ge-Te-In чрез рентгенов или неутронно-дифракционен анализ?

3. Както е посочено в дисертацията, според моделирането на плътността на състоянията, ширината на забранената зона на бинарните състави GeTe_4 и GeTe_5 намалява с увеличаване на съдържанието на In. Съществува ли информация над какви концентрации на индия започва да се проявява този ефект в реални експериментални условия и доколко параметрите на проведените в дисертацията симулации отговарят на тях?

7. Лични впечатления за дисертанта.

Познавам Анди Зайдан от края 2010 г., когато беше зачислен като редовен докторант в катедра „Физика“. Натрупаният от него опит преди началото на докторантурата му послужи за бързо изграждане на авторитета му като изследовател. Имам впечатления от неговото постоянство, усърдие и отдаденост на научните изследвания, а също и от умението му да работи в колектив.

Убедена съм, че с изработването и защитата на дисертацията си, Анди Зайдан ще направи следваща успешна крачка в професионалното си развитие.

8. Общо заключение.

Оценявам положително сериозните научни и научно-приложни приноси на дисертацията на Анди Хамим Зайдан. Считам, че представеният дисертационен труд на тема „Тънки халкогенидни слоеве за оптоелектрониката” и с научен ръководител проф. д-р Пламен Петков е с висока стойност и отговаря изцяло на изискванията на Закона за развитие на Академичния състав в Република България (ЗРАСРБ), на Правилника за прилагането му, както и на Правилника на ХТМУ за придобиване на образователната и научна степен „доктор”.

Въз основа на гореизложеното, с убеденост предлагам на Научното жури да присъди на Анди Хамим Зайдан образователната и научна степен „доктор” по научна специалност 5.6. Материали и материалознание (Технология на полупроводниковите материали и електронните елементи).

29.07.2013 г.

Рецензент:



София

/доц. д-р Е. Кашчиева/