

УДК 372.853:004.94

DOI: 10.15587/1729-4061.2020.195253

Методи розробки комп'ютерних засобів для вимірюювання та аналізу електричних властивостей напівпровідникових плівок

Р. Б. Дунець, Б. С. Дзундза, М. В. Дейчаківський, В. І. Мандзюк,
А. І. Терлецький, О. П. Поплавський

Представлено методика та розроблено комп'ютерні засоби автоматизованого вимірювання електричних параметрів та обробки отриманих експериментальних даних із врахуванням моделей опису фізичних процесів, які визначають експлуатаційні характеристики напівпровідникового матеріалу. Реалізована можливість автоматизованого дослідження якості та омічності контактів, що значно підвищує надійність отриманих даних.

Розглянуто методи і особливості програмної обробки результатів автоматизованих досліджень за допомогою моделей, які дають можливість врахувати вплив поверхні та структури і товщини зразка на електричні властивості напівпровідникових плівок.

Проведено експериментальні дослідження серії тонких плівок n-PbTe та показано ефективність розроблених засобів і методик обробки наукових даних із застосуванням описаних методик аналізу експериментальних даних. На основі моделювання визначено електричні параметри приповерхневих шарів, розділено вплив поверхневого та зернограничного механізмів розсіювання носіїв заряду на електричні параметри плівок, при цьому поверхнева рухливість носіїв заряду приблизно в 3 рази менша рухливості в об'ємі матеріалу, що незважаючи на високій коефіцієнт дзеркальності (0,4) вказує на домінування дифузного розсіювання носіїв заряду на поверхні досліджуваних тонкоплівкових зразків. Врахування впливу поверхні та меж зерен дає можливість вибрати технологічні режими та тривалість наплення для отримання напівпровідникового матеріалу з потрібними властивостями.

В результаті використання розроблених засобів вдалося значно зменшити трудомісткість процесу вимірювання основних електричних параметрів напівпровідникових матеріалів, обробки отриманих експериментальних результатів, підвищити точність отриманих результатів

Ключові слова: комп'ютерні засоби, автоматизація, алгоритми мінімізації, контакти, електричні властивості

1. Вступ

Бурхливий розвиток комп'ютерних технологій в останні десятиліття призвів до того, що на сьогодні комп'ютер став основним інструментом при первинній обробці результатів наукових експериментів. Розроблено велику кількість універсальних програм та середовищ для комп'ютерної обробки даних, зокрема, програмні пакети Maple, MathCAD, LabView, Origin та ін. Дані засоби достатньо універсальні, але потребують достатньо часу на їх освоєння, напи-

сання програм для реалізації тих чи інших моделей. Багато складнощів також є з інтеграцією таких засобів в уже існуючі лабораторні комплекси для експрес аналізу даних в процесі вимірювання. Тому розробка спеціалізованих комп'ютерних засобів дослідження електричних властивостей тонкоплівкових напівпровідникових матеріалів, методики обробки, програмної фільтрації та апроксимації даних із врахуванням моделей фізичних процесів та ефектів, які визначають властивості матеріалу залишається актуальною.

2. Аналіз літературних даних і постановка проблеми

Для дослідження властивостей напівпровідників на даний час розроблена велика кількість методів. Серед теоретичних методів слід відзначити методи моделювання та чисельні квантово-механічні розрахунки, які застосовуються для моделювання електронної структури молекул та конденсованих фаз речовини [1, 2]. При правильно вибраних моделях дані методи дозволяють шляхом комп'ютерних розрахунків отримати багато інформації про властивості напівпровідників, зокрема врахувати вплив поверхні та легуючих домішок на електричні властивості матеріалу. Але основним недоліком цих методів є потреба в великих обчислювальних потужностях та тривалій час розрахунків. Щодо експериментальних методів, то у галузі напівпровідникового матеріалознавства накопичено велику кількість даних, методів їх статистичної та математичної обробки. Останнім часом велика увага приділяється експериментальним дослідженням властивостей напівпровідникових сполук типу $A^{III}B^V$ [3] та $A^{IV}B^{VI}$ [4], зокрема у вигляді тонких плівок та наноструктур. Такі дослідження є досить трудомісткі і вимагають автоматизації як процесу вимірювання, так і подальшої комп'ютерної обробки даних. Проблема комп'ютерної обробки даних частково розглядається в роботах [5, 6], де, зокрема, розглянуто дослідження параметрів та характеристики напівпровідникових приладів із застосуванням сучасних комп'ютерних технологій, а електронні засоби дослідження вольт-амперних характеристик описано авторами [7]. Дані роботи в основному стосуються комп'ютерних засобів дослідження готових напівпровідникових приладів і модулів і лише частково зачіпають дослідження напівпровідникових матеріалів.

Для розробки засобів комп'ютерного аналізу важливо правильно вибрати основні параметри, що визначають електричні властивості напівпровідникових матеріалів, функцією відгуку та математичну модель. Електричні властивості тонкоплівкових напівпровідникових матеріалів визначаються кінетичними параметрами. Зокрема, у роботі [8] представлена модель, яка описує механізми розсіювання носіїв заряду, а авторами [4, 9] описано методики врахування впливу міжкристалітних меж зерен на електропровідність полікристалічної плівки. Зокрема у роботі [4] приведена бар'єрна теорія провідності, яка розглядає міжкристалітну межу як потенціальний бар'єр, якій призводить до розсіювання носіїв заряду. Крім границь зерен у тонкоплівковому матеріалі важливий вплив має вільна поверхня плівки. Методика врахування впливу поверхневих ефектів описана в роботі [10]. Не зважаючи на велику кількість спрощень і припущень, врахування впливу поверхні і міжзеренних меж за описаними в [4, 8–10] методиками і моделями дозволяє визначити розсіювання носіїв заряду які мають домінуючий вплив на електричні

властивості матеріалу. Авторами [11], розроблена методика комп'ютерного моделювання готових приладових структур, що показує достатньо потужні можливості сучасних комп'ютерних засобів дослідження.

При застосуванні даних методик виникає необхідність обробки великих масивів даних, застосування різних математичних методів аналізу і в основному реалізуються із застосуванням складних математичних пакетів програм, та є досить трудомістким.

Аналіз літературних джерел показав, що існує достатня кількість методів і моделей, які добре описують електричні властивості тонкоплівкових напівпровідникових матеріалів, але практично немає спеціалізованих комп'ютерних засобів для їх швидкого застосування, особливо вже в процесі експерименту, і розробка таких засобів може значно спростити експериментальні дослідження.

3. Мета і завдання дослідження

Метою роботи є вибір методів та розробка комп'ютерних засобів вимірювання та аналізу електричних властивостей тонкоплівкових напівпровідникових матеріалів з врахуванням моделей фізичних процесів та ефектів, які визначають властивості матеріалу.

Для досягнення поставленої мети вирішувалися наступні завдання:

- визначити основні параметри та моделі, які описують властивості тонкоплівкових напівпровідникових матеріалів;
- представити алгоритми для створення засобів автоматизованого вимірювання і попередньої обробки експериментальних даних із врахуванням вибраних моделей опису фізичних процесів, які визначають експлуатаційні характеристики напівпровідникового матеріалу;
- провести дослідження електричних параметрів серії тонких напівпровідникових плівок n-PbTe та оцінити ефективність розроблених засобів.

4. Вибір моделей та параметрів які описують властивості тонкоплівкових напівпровідникових матеріалів

Вибір моделей, факторів та методів обробки експериментальних даних базувався на врахуванні фізичних процесів перенесення носіїв заряду в тонких плівках, які здійснюють основний вклад у експлуатаційні властивості напівпровідникового тонкоплівкового матеріалу.

Для подальшого аналізу накопичених експериментальних даних вибрано основні фізичні моделі, які описують основні електричні властивості напівпровідника і дають можливість визначити параметри, що не підлягають прямим вимірюванням, та оцінити механізми провідності і розсіювання носіїв заряду.

У тонких плівках параметри приповерхневого шару сильно відрізняються від об'ємного. Тому для оцінки електричних властивостей приповерхневого шару у плівках доцільно використовувати двошарову модель Петріца [7]. Тонку плівку у цій моделі представляють складеною з двох шарів: приповерхневого (s) (область поверхневого заряду) завтовшки d_s , концентрація носіїв струму в якому p_s , а їх рухливість μ_s , і об'ємного (b), що характеризується аналогічними величинами (d_b, p_b, μ_b), які з'єднані паралельно. Товщина плівки $d = d_s + d_b$.

У цьому випадку згідно [7]:

$$\sigma = \frac{\sigma_s d_s + \sigma_b d_b}{d}; \quad (1)$$

$$R = \frac{R_s \sigma_s^2 d_s + R_b \sigma_b^2 d_b}{(\sigma_s d_s + \sigma_b d_b)^2} d; \quad (2)$$

$$\mu = \sigma R = \frac{\sigma_s^2 d_s R_s + \sigma_b^2 d_b R_b}{\sigma_s d_s + \sigma_b d_b}; \quad (3)$$

$$S = \frac{S_s \sigma_s d_s + S_b \sigma_b d_b}{\sigma_s d_s + \sigma_b d_b}. \quad (4)$$

За умови відомих експериментальних значень σ , R , μ , об'ємних σ_b , R_b , μ_b , S_b та загальної товщини плівки d , із даних співвідношень можна наближено визначити товщину d_s і параметри приповерхневого шару σ_s , R_s , μ_s , S_s відповідно.

Для визначення поверхневих коефіцієнтів використовувався метод найменших квадратів. При апроксимації провідності формулою (1) отримуємо функцію двох змінних d_s і σ_s , мінімізацію якої реалізували з застосуванням алгоритму мінімізації функцій багатьох змінних методом деформованого багатогранника (за Нелдером і Мидом). Блок-схема даного алгоритму наведена у роботі [12]. Дана методика хоч і є достатньо простою, але її реалізація показала хорошу ефективність – знаходження мінімуму відбувається за 80–100 ітерацій і займає частки секунди.

Більш точною моделлю, яка описує кінетичні процеси в тонких плівках, є модель Фукса-Зондгеймера [8]. Дана модель добре описує товщинні залежності електричних параметрів тонких плівок, дає можливість визначити домінуючі механізми розсіювання носіїв заряду, враховуючи розмірні ефекти, пов'язані саме з розсіюванням на зовнішніх поверхнях плівки. Електропровідність плівки σ визначається з кінетичного рівняння Больцмана [8, 13] і для граничного випадку $k \gg 1$ (товсті плівки) рівна:

$$\sigma = \sigma_b \left(1 + \frac{3}{8k} (1-p) \right)^{-1}, \quad k \gg 1. \quad (5)$$

Для досить тонких плівок ($k \ll 1$)

$$\sigma = \sigma_b \frac{3}{4} \frac{1+p}{1-p} k \ln \frac{1}{k}, \quad k \ll 1, \quad (6)$$

де σ_b – електропровідність масивного зразка, безрозмірна товщина $k=d/l$, l – довжина середнього пробігу електронів, p – коефіцієнт дзеркальності (імовірність дзеркального відбивання, $0 \leq p \leq 1$). При $p=0$ маємо дифузне розсіювання, а при $p=1$ – чисто дзеркальне відбивання.

У рамках моделі Зонгеймера прояв розмірного ефекту в залежностях коефіцієнта Холла R_H від товщини плівки для випадку магнітного поля, напрямленого перпендикулярно до поверхні, може бути визначений з співвідношення [8]:

$$R_H = R_{Hb} \frac{4}{3} \frac{1-p}{1+p} \frac{1}{k(\ln k^{-1})^2}, \quad k \ll 1. \quad (7)$$

Рухливість носіїв струму у випадку дифузного розсіювання на поверхні визначається як [14]:

$$\mu = \mu_b \left(1 + \frac{d}{l}\right)^{-1}, \quad (8)$$

де μ_b – рухливість носіїв струму в об'ємному матеріалі.

Для полікристалічних плівок, крім вільної поверхні, електронний транспорт носіїв струму визначається як самими кристалітами, так і міжзеренними бар'єрами [4]. Якщо структура кристалітів упорядкована, то міжзеренні межі є розупорядкованими. Враховуючи природу області меж зерен, згідно моделі, запропонованої у роботі [15], електронні властивості полікристалу визначаються захопленням носіїв обірваними зв'язками атомів, які локалізовані на міжзеренних межах. Для бар'єрної області розглядають два основні механізми переносу заряду: термоелектронної надбар'єрної емісії і підбар'єрного тунельного транспорту. У цьому випадку провідність полікристалу з розміром кристаліта L буде визначатися як [15].

$$\sigma = \frac{Lq^2 p}{\sqrt{2\pi m^* kT}} e^{-\frac{qV_b}{kT}}. \quad (9)$$

Враховуючи, що

$$\sigma = q\mu p, \quad (10)$$

ефективне значення рухливості при цьому буде становити

$$\mu = \frac{Lq}{\sqrt{2\pi m^* kT}} e^{-\frac{E_b}{kT}}, \quad (11)$$

де $E_b = qV_b$, V_b – потенціал бар'єру, q – заряд електрона, T – температура, k – стала Больцмана, m^* – ефективна маса носія заряду, p – концентрація носіїв струму.

5. Розробка алгоритмів та засобів автоматизованого вимірювання електричних параметрів напівпровідникових плівок та обробки отриманих експериментальних даних

При дослідженні електричних властивостей напівпровідників вимірюють такі основні параметрами як питому електропровідність, холлівській коефіцієнт, термоелектрорушійну силу з яких визначають концентрацію і рухливість носіїв заряду, які і визначають їх основні експлуатаційні характеристики. Але для тонких плівок ключову роль відіграють вплив структури і поверхневих ефектів, які не піддаються прямим вимірюванням, але добре описується розглянутими вище теоретичними моделями.

Вибрані моделі враховують основні фізичні процеси, які здійснюють вклад у експлуатаційні властивості напівпровідникового матеріалу і дозволяють вибрати необхідні для аналізу експериментальні параметри, враховуючи товщину і структуру досліджуваного матеріалу, та розробити комп'ютерні автоматизовані засоби, які дозволяють визначити переважаючий механізм розсіювання носіїв, оцінити параметри поверхневих шарів, міжзеренних меж, які не піддаються прямим вимірюванням.

Оскільки процес вимірювання електричних параметрів є достатньо трудомісткий, спочатку було розроблено методику і автоматизований апаратно-програмний вимірювальний комплекс для отримання як електричних, так і термоелектричних параметрів напівпровідникових матеріалів [16]. Як результат, виникає необхідність обробки великої кількості експериментальних даних. Також зручно мати можливість експрес-аналізу даних вже в процесі експерименту. Надійність і омичність електричних контактів при вимірюваннях має важливе значення, так як їх порушення призводить до виникнення великих похибок і промахів. Аналіз контактів в процесі вимірювання значно підвищує надійність і достовірність отриманих результатів, виключаючи завідомо невірні дані, наприклад, при порушенні контактів чи виникненні мікротріщин в плівці, які можуть виникнути внаслідок термічних чи механічних напружень. Тому розроблений програмно-апаратний комплекс було суттєво допрацьовано, що відображено на структурній схемі (рис. 1), зокрема, добавлено аналітичний модуль та модуль самодіагностики. Аналітичний модуль може використовувати базу даних попередніх експериментів, що дає можливість ефективно аналізувати отримані дані для зразків одної серії, які відрізняються, наприклад, товщиною.

Для дослідження якості та омичності контактів зручно аналізувати вольт-амперну характеристику на предмет лінійності і симетричності в обох напрямках протікання струму. Так як електричний опір при малих тестових струмах, які суттєво не нагрівають зразок, є сталим, то залежність струму від напруги лінійна $I=GU$. Аналіз даної характеристики дає можливість оцінити якість контактів і правильність вибору контактного матеріалу. Величина провідності G також потрібна для аналізу результатів вимірювання на цілісність контактів та відсутність пошкоджень зразка в процесі експерименту.

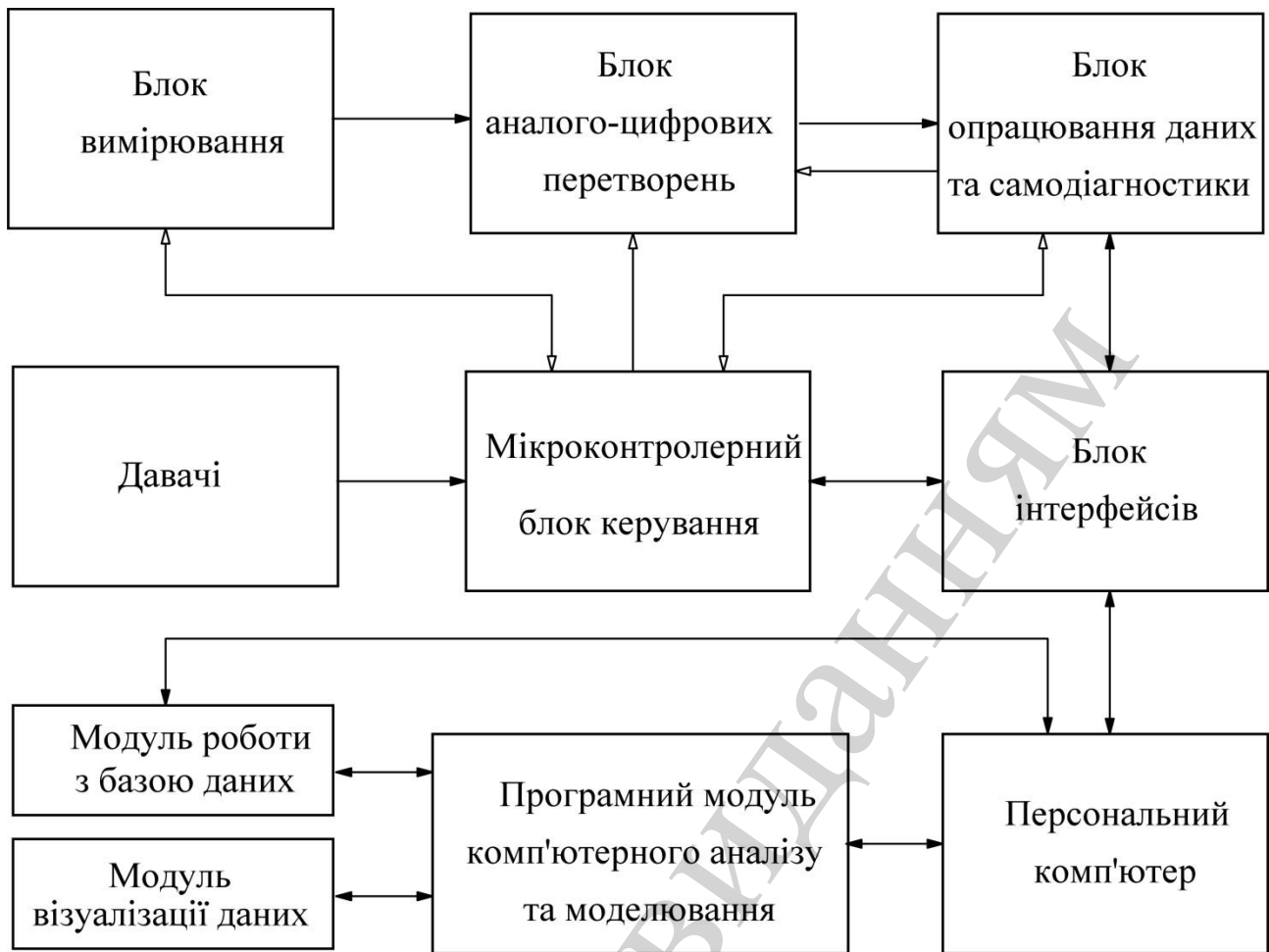


Рис. 1. Блок схема спеціалізованої комп'ютерної системи для дослідження та моделювання електричних властивостей тонкоплівкових напівпровідникових матеріалів. Стрілки залиті чорним – інформаційні, а прозорі – керуючі.

Для автоматизованого аналізу було застосовано метод найменших квадратів, який для одного параметра розв'язується аналітично. Середнє квадратичне відхилення отриманих результатів s в обох напрямках струму не повинно перевищувати деякої величини ϵ , яка визначається інструментальною та методичною похибкою вимірювання. Спрощений алгоритм вимірювання вольт-амперної характеристики і аналізу якості контактів зображено на рис. 2.

Програмний модуль комп'ютерного аналізу та моделювання написаний в середовищі Delphi. Не надто популярне на даний час середовище розробки застосоване для повної сумісності з раніше розробленою програмою керування та модулем візуалізації. Для реалізації всіх трьох моделей необхідно здійснювати апроксимацію даних різними залежностями, з різною кількістю параметрів. Враховуючи це, процедуру, яка реалізує метод найменших квадратів із застосуванням алгоритму мінімізації функцій багатьох змінних методом деформованого багатогранника, зроблено параметризованою. Реалізовано можливість вибору як виду функції, так і кількості змінних, а також налаштування параметрів апроксимації. Програма має зручний графічний інтерфейс, представлений на рис. 3.

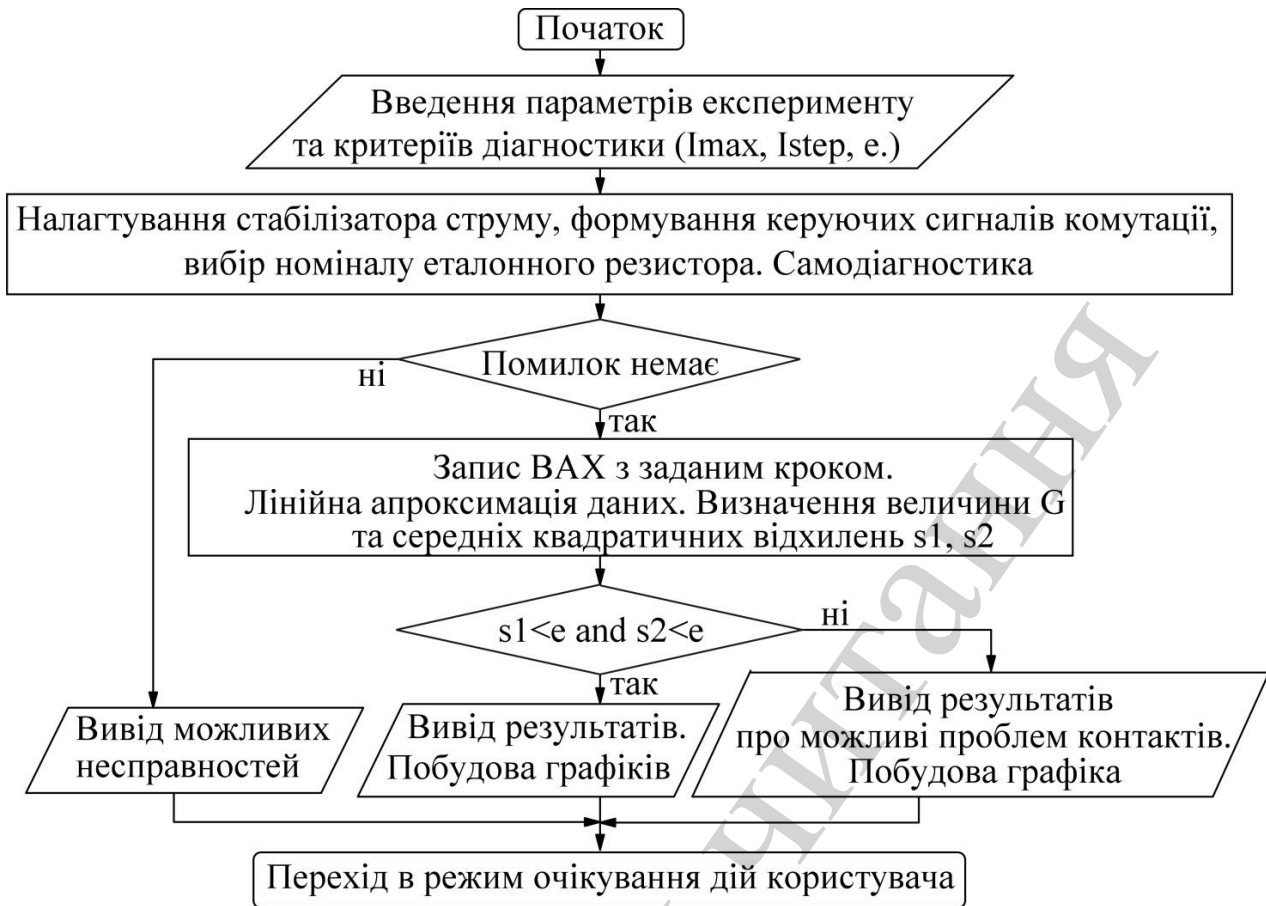


Рис. 2. Алгоритм вимірювання вольт-амперної характеристики і аналізу якості контактів.

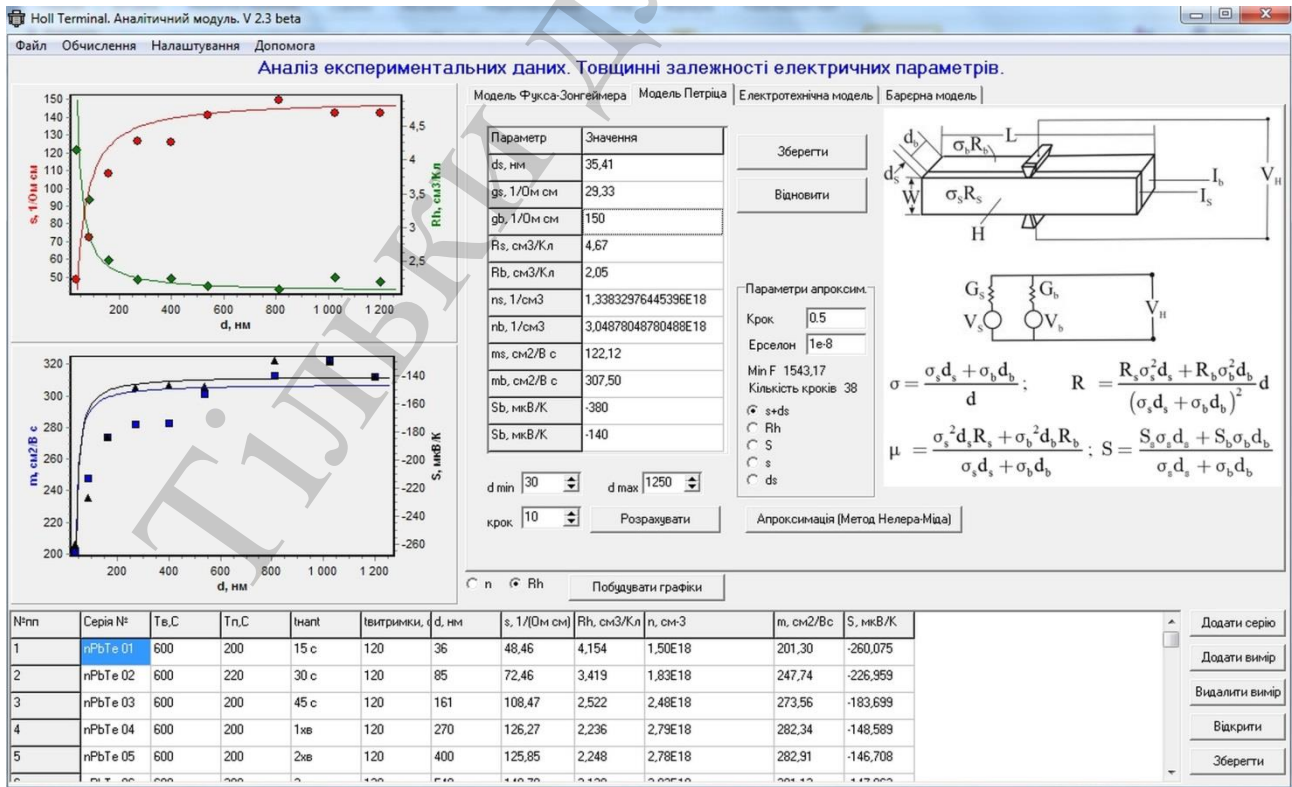


Рис. 3. Загальний вигляд вікна аналітичного модуля програми

Для кожної з розглянутих вище моделей в програмі реалізована окрема вкладинка (tabs) з можливістю задати відомі параметри та вибрати режими аналізу і параметри апроксимації. У нижній частині програми у вигляді таблиці відображаються систематизовані експериментальні дані, а ліва частина вікна програми відведена під відображення отриманих параметрів у вигляді графіків.

На рис. 3. представлено результати розрахунку згідно моделі Петріца, для розрахунку використовуються відомості про електричні параметри об'ємного матеріалу та результати експериментальних вимірювань на основі яких визначаються електричні параметри при поверхневого шару. З моделі Фукса-Зондгеймера, апроксимуючи результати експерименту залежностями (5)–(7), отримуємо коефіцієнт розсіювання носіїв заряду поверхнею плівки. А використовуючи залежність (11), можна отримати рухливість носіїв заряду, яка пов'язана з впливом міжзеренних меж. Розробка програмних засобів з використанням досить простих алгоритмів апроксимації з візуалізацією даних дозволяє проводити попередній аналіз отриманих даних вже в процесі експерименту.

6. Експериментальні дослідження та аналіз отриманих даних

Розглянемо роботу модуля комп'ютерного аналізу даних на прикладі реальних досліджень серії тонких напівпровідникових плівок n-PbTe. Плівки для дослідження отримували термічним вакуумним методом із наперед синтезованого матеріалу n-PbTe на підкладки із свіжих сколів (0001) слюди-мусковіт. Товщину плівок задавали часом осадження в межах (0,25–9) хв та вимірювали за допомогою мікроінтерферометра МІІІ-4. Дані про товщину плівок вносили в базу даних програми вручну.

Було проведено вимірювання електричних параметрів для 9 зразків різної товщини. На рис. 3. на знімку робочого екрана представлено загальний вигляд аналітичного модуля програми з опрацьованими даними для розглянутої серії зразків згідно моделі Петріца представлений.

На рис. 4 наведено експериментальні дані для питомої електропровідності і коефіцієнта Холла для отриманої серії зразків, а також співставленні результати розрахунків за моделлю Петріца та моделлю Фукса-Зондгеймера. Як видно з даного рисунка, обидві моделі добре описують експеримент.

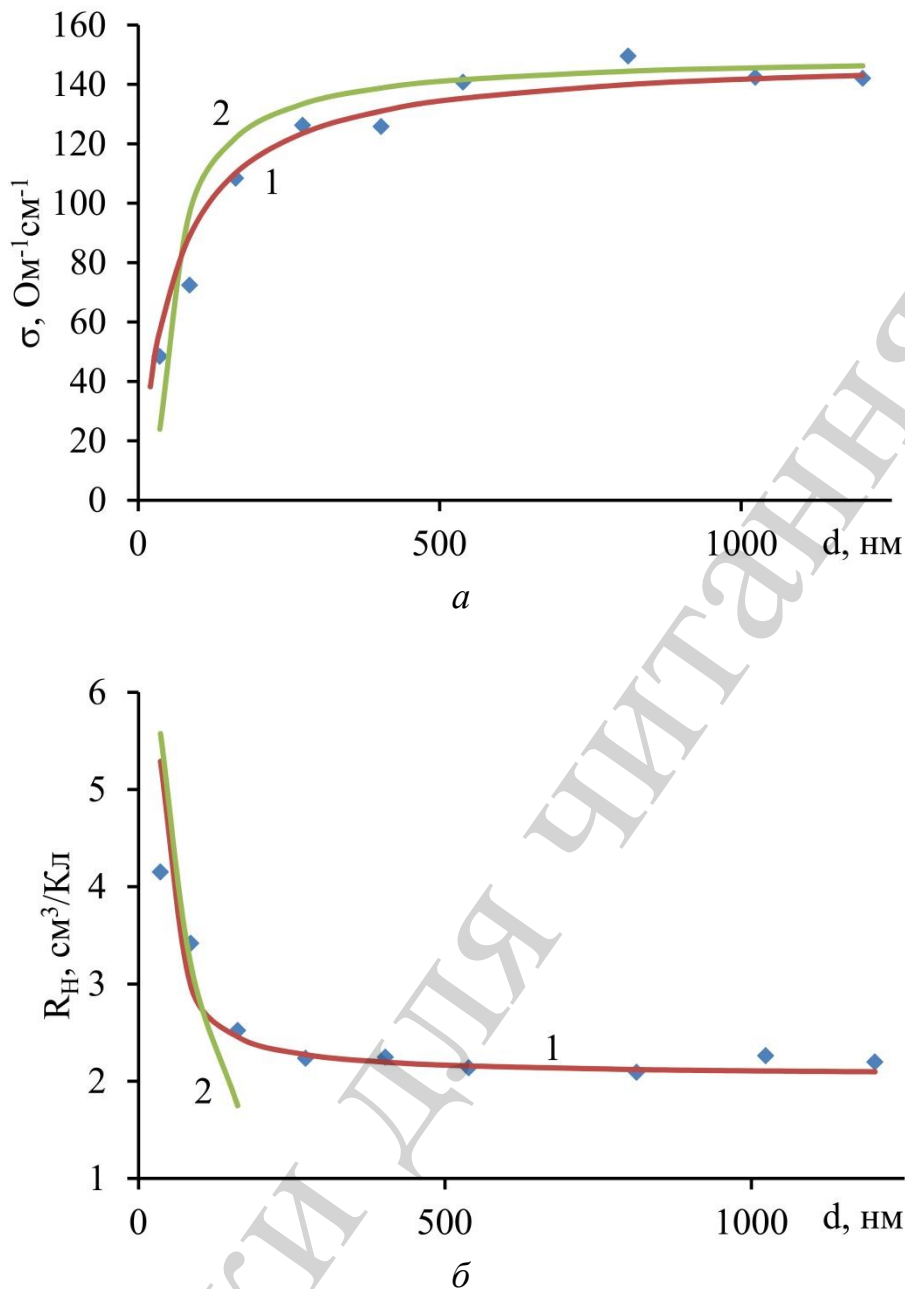


Рис. 4. Товщинні залежності електричних параметрів для зразків PbTe: *a* – питомої електропровідності, *б* – коефіцієнта Холла (♦– експеримент, крива 1 – розрахунок згідно моделі Петріца, 2 – розрахунок згідно моделі Фукса-Зонгеймера)

На рис. 4, криві 1 розраховані з рівнянь (1), (2), а крива 2 розрахована для тонких плівок ($k < 1$) з рівнянь (5)–(7). Тут враховані тільки експериментальні дані, які відповідають вказаній умові. У табл. 1 зведено всі результати, отримані внаслідок моделювання. Також проведено розрахунок впливу границь зерен, які створюють потенціальний бар'єр, отримано енергію активації електропровідності 0,08–0,1 еВ, що вказує на відносно невеликий вплив границь зерен на загальну електропровідність матеріалу. Слід звернути увагу, що отриманий коефіцієнт дзеркальності 0,4 та довжина вільного пробігу 260 нм добре співпадають із даними аналогічних досліджень. Отриманий результат пояснюється тим,

що для плівок, отриманих на слюді, характерною є мозаїчна структура, що забезпечує отримання тонкоплівкового матеріалу з достатньо високою структурною досконалістю.

Таблиця 1

Електричні параметри поверхневого шару тонких плівок n-PbTe

Параметри приповерхневого шару	
$\sigma_s, \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$	21,21
$R_{Hs}, \text{ см}^3/\text{Кл}$	4,67
$n_s, \text{ см}^{-3}$	$1,34 \cdot 10^{18}$
$\mu_s, \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$	99,05
$S_s, \text{ мкВ/К}$	-380
$d_s, \text{ нм}$	35,18

7. Обговорення результатів застосування розроблених комп'ютерних засобів

Аналіз отриманих результатів та порівняння результатів розрахунку з експериментальними вимірюваннями (рис. 4.) показав, що вибрані моделі добре описують експериментальні дані, зокрема з рівнянь (1)–(4) отримані параметри приповерхневого шару, які представлено в табл. 1, а з рівнянь (5)–(7) визначено коефіцієнт дзеркальності поверхні, та довжину вільного пробігу носіїв заряду. Незважаючи на відносну простоту реалізованих алгоритмів, розроблені автоматизовані комп'ютерні засоби показали високу ефективність, наприклад перевірка лінійності вольт-амперної характеристики практично не збільшує час експерименту, але дає можливість оцінити якість контактів, і в разі виникнення дефектів відразу виявити проблему.

Перевагою реалізованого методу досліджень є автоматизація як процесу вимірювання, так і попередньої обробки результату вже в процесі експерименту згідно вибраних моделей в залежності від досліджуваного матеріалу. Це дає можливість визначити основні електричні характеристики матеріалу, такі як концентрація і рухливість носіїв заряду, вплив поверхні та домінуючі механізми провідності. А візуалізація отриманих результатів у вигляді графічних залежностей дає можливість візуально виявляти промахи, дефектні зразки уже в процесі вимірювання. У порівнянні з універсальними засобами та математичними пакетами програм, які дають значно ширші можливості обробки даних, розробка спеціалізованих засобів, незважаючи на обмежений набір моделей, добре інтегрується у розроблений вимірювальний комплекс і дозволяє отримати інформацію про електричні властивості тонкоплівкового напівпровідникового матеріалу з мінімальними трудоватратами та скорочує час, необхідний для вимірювання та обробки.

Використання достатньо спрощених моделей, які враховують тільки класичні ефекти і добре описують властивостей тонко плівкового матеріалу, накладає деякі обмеження на застосування розроблених засобів для аналізу нано- та 2D структур, де основну роль відіграють квантові ефекти. Для подальшого вдосконалення розроблених засобів ведеться робота по добавленні в аналітич-

ний модуль моделей, які б враховували квантово-розмірні ефекти, можливості статистичної обробки даних та алгоритмів розрахунку мінімальної достатньої кількості вимірювань з врахуванням уже наявних даних.

6. Висновки

1. Визначенні моделі, та основні параметри, які дають можливість розрахувати концентрацію та рухливість носіїв заряду та врахувати вплив поверхні та структури плівки і встановити домінуючі механізми розсіювання.

2. Представлено методику, алгоритм, структурну схему та розроблено комп'ютерні засоби автоматизованого вимірювання та обробки експериментальних даних з врахуванням моделей опису фізичних процесів, які визначають експлуатаційні характеристики напівпровідникового матеріалу, що значно зменшило затрати часу на проведення і обробку експерименту.

3. З використанням розроблених засобів проведено експериментальні дослідження серії тонких плівок n-PbTe, визначено електричні параметри приповерхневих шарів, при цьому поверхнева рухливість носіїв заряду приблизно в 3 рази менша рухливості в об'ємі матеріалу, що незважаючи на високій коефіцієнт дзеркальності (0,4) вказує на домінування дифузного розсіювання носіїв заряду на поверхні досліджуваних тонкоплівкових зразків. Показано високу ефективність розроблених засобів для проведення подібних досліджень.

Література

1. Jones, R. O., Gunnarsson, O. (1989). The density functional formalism, its applications and prospects. *Reviews of Modern Physics*, 61 (3), 689–746. doi: <https://doi.org/10.1103/revmodphys.61.689>

2. Найдич, Б. П. (2018). Розрахунок стабільності і перебудова поверхні кристалів в рамках DFT-обчислень. *Фізика і хімія твердого тіла*, 19 (3), 254–257. doi: <https://doi.org/10.15330/pcss.19.3.254-257>

3. Novosyadlyj, S., Dzundza, B., Gryga, V., Novosyadlyj, S., Kotyk, M., Mandzyuk, V. (2017). Research into constructive and technological features of epitaxial gallium-arsenide structures formation on silicon substrates. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*, 3 (5 (87)), 54–61. doi: <https://doi.org/10.15587/1729-4061.2017.104563>

4. Ruvinskii, M. A., Kostyuk, O. B., Dzundza, B. S., Yaremiy, I. P., Mokhnatskyi, M. L. (2017). Kinetic Phenomena and Thermoelectric Properties of Polycrystalline Thin Films Based on PbSnAgTe Compounds. *Journal of Nano- and Electronic Physics*, 9 (5), 05004-1–05004-6. doi: [https://doi.org/10.21272/jnep.9\(5\).05004](https://doi.org/10.21272/jnep.9(5).05004)

5. De Boor, J., Müller, E. (2013). Data analysis for Seebeck coefficient measurements. *Review of Scientific Instruments*, 84 (6), 065102. doi: <https://doi.org/10.1063/1.4807697>

6. Глинченко, А. С., Комаров, В. А., Тронин, О. А. (2012). Компьютерные спектральные измерения и их приложения. *Успехи современной радиоэлектроники*, 9, 025–028.

7. Ермоленко, Е. А. (2014). Классификация методов измерения вольт-амперных характеристик полупроводниковых приборов. *Технология и кон-*

струирование в электронной аппаратуре, 2-3, 3–11. doi: <https://doi.org/10.15222/kea2014.2-3.03>

8. Sondheimer, E. H. (1950). The Influence of a Transverse Magnetic Field on the Conductivity of Thin Metallic Films. *Physical Review*, 80 (3), 401–406. doi: <https://doi.org/10.1103/physrev.80.401>

9. Салій, Я. П., Фреїк, І. М. (2004). Електротехнічна модель електропровідності тонких полікристалічних плівок PbTe. *Фізика і хімія твердого тіла*, 5 (1), 94–95.

10. Petritz, R. L. (1958). Theory of an Experiment for Measuring the Mobility and Density of Carriers in the Space-Charge Region of a Semiconductor Surface. *Physical Review*, 110 (6), 1254–1262. doi: <https://doi.org/10.1103/physrev.110.1254>

11. Kogut, I. T., Holota, V. I., Druzhinin, A., Dovhij, V. V. (2016). The Device-Technological Simulation of Local 3D SOI-Structures. *Journal of Nano Research*, 39, 228–234. doi: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/jnanor.39.228>

12. Цибанов, В. В. Программа минимизации функции многих переменных методом деформируемого многогранника (по Нелдеру и Миду). doi: <http://doi.org/10.13140/RG.2.2.31221.88803>

13. Ruvinskii, M. A., Kostyuk, O. B., Dzundza, B. S., Makovyshyn, V. I. (2017). The Influence of Surface on Scattering of Carriers and Kinetic Effects in n-PBTE Films. *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*, 15 (2), 277–288. doi: <https://doi.org/10.15407/nnn.15.02.0277>

14. Tellier, C. R., Rabel, M., Tosser, A. J. (1978). Hall coefficient of thin films in a mean free path model. *Journal of Physics F: Metal Physics*, 8 (11), 2357–2365. doi: <https://doi.org/10.1088/0305-4608/8/11/019>

15. Khokhlov, D. (2003). *Lead Chalcogenides: Physics and Applications*. Taylor & Francis.

16. Дзундза, Б. С. (2018). Автоматизований програмно-апаратний комплекс для вимірювання термоелектричних параметрів напівпровідникових матеріалів. *Термоелектрика*, 5, 5–12.