ВИСНОВОК

про наукову новизну, теоретичне і практичне значення результатів дисертації Лешко Ольги Володимирівни на тему: «Оптичні властивості сферичних неконцентричних квантових точок типу ядро-оболонка», що подається на здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 105 «Прикладна фізика та наноматеріали» галузі знань 10 «Природничі науки»

Актуальність теми дисертації

У сучасній оптоелектроніці все більшої уваги набувають низькорозмірні наносистеми, серед яких особливе місце займають квантові точки (КТ) типу ядро-оболонка. Завдяки своїм унікальним оптичним та електронним властивостям, такі структури демонструють високу ефективність у пристроях нового покоління — світловипромінювальних діодах, сонячних концентраторах і детекторах випромінювання. Їхня здатність ефективно поглинати й випромінювати світлову енергію у широкому діапазоні довжин хвиль дозволяє значно підвищити продуктивність оптоелектронних приладів, що є важливим фактором в умовах сучасних технологічних викликів, пов'язаних із розвитком енергозберігаючих і високоінформаційних систем.

Особливої актуальності набуває вивчення механізмів зменшення оптичного миготіння та покращення стабільності люмінесценції КТ, оскільки ці параметри безпосередньо впливають на надійність та довговічність світловипромінювальних елементів. Просторове розділення носіїв заряду, впровадження домішок і моделювання плавного потенціалу, демонструють ефективність у зниженні впливу поверхневих дефектів. Це відкриває перспективи для створення стабільних, неблимаючих джерел

світла, а також більш ефективних сонячних пристроїв із покращеними характеристиками енергетичної конверсії на основі КТ типу ядро-оболонка.

Дослідження сферичних неконцентричних квантових точок типу ядро-оболонка (СНКТЯО) є актуальним завданням у контексті того, що більшість таких реально синтезованих структур мають зміщене ядро. Така неконцентричність впливає на розподіл електронів і дірок, домішкові рівні та взаємодії між носіями, змінюючи, відповідно, оптичні властивості КТ. Крім того, можливість зовнішнього керування цими параметрами прикладеним електричним полем відкриває нові шляхи до точного налаштування характеристик КТ для специфічних практичних застосувань. Отже, вивчення впливу параметра неконцентричності, домішок та електричного поля на спектри й оптичну поведінку СНКТЯО є важливим як для фундаментальної науки, так і для прикладної інженерії наноструктур.

Зв'язок теми дисертації з державними програмами, науковими напрямами університету та кафедри

Дисертаційне дослідження узгоджується з науковою тематикою та планами кафедри фізики та інформаційних систем Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка. Основні результати дисертанткою отримані в рамках виконання таких тем:

1. Кафедральна тема "Отримання та дослідження фізичних властивостей нанокомпозитних матеріалів на основі широкозонних напівпровідників" (2022–2025 роки).

2. "Фотополімерні матриці та наноносії при конструюванні біосенсорів для моніторингу стану довкілля та якості питної води" (2021–2023; державний реєстраційний номер 0121U109539).

3. “Вплив зовнішніх полів на синтез, сенсорні властивості квантових точок для медичних застосувань в умовах війни.” (2024–2025 роки, державний реєстраційний номер 0124U001093).

4. “Біонанокомплекси напівпровідникова квантова точка – протеїн для біомедичних застосувань: синтез, дослідження, характеризація з використанням машинного навчання” (2025-2027, 0125U002002).

Особиста участь автора в одержанні наукових та практичних результатів, що викладені в дисертаційній роботі

Дисертаційна робота виконана на кафедрі фізики та інформаційних систем Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка. Розглянувши звіт подібності щодо перевірки на плагіат, рецензенти дійшли висновку, що дисертаційна робота Лешко О. В. є результатом самостійних досліджень здобувачки і не містить елементів плагіату та запозичень. Використані ідеї, результати і тексти інших авторів мають посилання на відповідне джерело. Внесок автора у наукові роботи, виконані у співавторстві, відображено у переліку опублікованих праць за темою дисертації.

Достовірність та обґрунтованість отриманих результатів та запропонованих автором рішень, висновків, рекомендацій

Достовірність отриманих результатів і висновків забезпечено застосуванням добре перевірених й апробованих аналітично-чисельних методів для розв’язання рівняння Шредінгера, зокрема варіаційного методу, методу розкладу хвильової функції за плоскими хвилями та методу скінчених елементів. Достовірність також гарантується узгодженістю отриманих теоретичних результатів з результатами,

отриманими іншими дослідниками. Ще одним підтвердженням достовірності отриманих результатів є їхня добра збіжність у граничних випадках з точними розв'язками відповідних простіших задач. Крім того обґрунтованість отриманих результатів у дисертаційному дослідженні забезпечується їхньою якісною і кількісною узгодженістю з даними експериментальних робіт, що стосуються розташування смуг поглинання і зсуву Стокса у КТ типу ядро-оболонка.

Ступінь новизни основних результатів дисертації порівняно з відомими дослідженнями аналогічного характеру

Наукова новизна одержаних результатів полягає у тому, що вперше:

1) розвинуто аналітичну теорію електронних і діркових станів у СНКТЯО;

2) досліджено залежність оптичного коефіцієнта поглинання від параметра неконцентричності СНКТЯО. Встановлено, що ліпше узгодження теоретичних результатів з експериментальними даними досягається при врахуванні дисперсії сферичних КТ CdSe/CdS за параметром неконцентричності;

3) доведено, що присутність домішки у СНКТЯО, яка розташована протилежно до зміщення ядра КТ, спричинює чергування виродження та розщеплення електронних рівнів збуджених станів. Зокрема можуть спостерігається протилежні впливи домішки та параметра неконцентричності, що зумовлює часткове відновлення сферично-симетричного розподілу електронної густини;

4) досліджено вплив параметра неконцентричності на величину електрон-діркової обмінної взаємодії у СНКТЯО CdSe/CdS. Показано, що зі збільшенням розмірів оболонки КТ енергія

електрон-діркової взаємодії зменшується. А це зменшує розщеплення енергетичних рівнів темного і світлого станів екситонів. Встановлено, що при фіксованих розмірах ядра та оболонки зміщення ядра від центру КТ має різний вплив залежно від радіуса оболонки: для малих радіусів енергія обмінної взаємодії зростає монотонно, а для більших — стає немонотонною. Отримано узгодження результатів з експериментальними даними;

5) встановлено, що ширину ефективної оптичної щілини у СНКТЯО можна регулювати шляхом прикладання зовнішнього електричного поля. Доведено, що прикладене електричне поле протилежно до напрямку зміщення ядра КТ спричинює відновлення виродження розщеплених електронних і діркових рівнів, яке існує завдяки неконцентричності КТ.

Теоретичне та практичне значення результатів дисертації. Використання результатів роботи

Результати, отримані в межах дисертаційного дослідження, можуть стати основою для вдосконалення процесів виготовлення КТ типу ядро-оболонка з урахуванням їхньої неконцентричності, що є особливо важливим для підвищення ефективності світлодіодів та сонячних концентраторів. Аналіз особливостей неконцентричних КТ дозволяє не лише передбачити їхні оптичні характеристики, а й мінімізувати негативний вплив структурних дефектів. Зокрема, виявлені закономірності можуть бути корисними під час розробки світлодіодів із стабільним світловипромінюванням — за рахунок точного налаштування взаємодії між електронами й дірками, а також контролю над домішками, що впливають на локалізацію зарядів у КТ.

Крім того, встановлена залежність оптичних параметрів від неконцентричності сферичної КТ та прикладеного зовнішнього електричного поля відкриває нові перспективи для створення ефективних люмінесцентних елементів у прозорих сонячних концентраторах, де необхідна точна передача енергії без втрат.

Перелік наукових праць, які відображають основні результати дисертації

Результати дисертаційного дослідження опубліковані в 14 наукових пряцях, з них: 7 статей (усі 7 статей видані у фахових журналах; усі 7 статей індексуються у базі Scopus/Web of Science; 4 статі у журналах, що мають Impact Factor; 2 з них у журналах з квартилями Q1-Q2, а 5 – у журналах з квартилями Q3-Q4) та 7 праць, що є матеріалами всеукраїнських чи міжнародних конференцій.

Наукові статті, опубліковані у виданнях, що входять до списку наукових фахових видань України та проіндексованих у наукометричних базах даних Scopus та/або Web of Science Core Collection

1. Leshko R. Ya., Bilynskyi I. V., Leshko O. V. Electron-hole exchange interaction in a spherical quantum dot with regard material deformation and polarization charges // Journal of Physical Studies. 2022. Vol. 26, № 1. P. 1720:1-10 (Scopus, Q4).

   (*Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки енергії обмінної взаємодії у сферичній квантовій точці з урахуванням деформації та поляризаційних зарядів на гетеромежі квантова точка-матриця, побудовано графічно усі залежності*).

2. Leshko R. Ya., Bilynskyi I. V., Leshko O. V., Holskyi V. B. Electron energy spectrum of the spherical GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ quantum dot with several impurities on the surface // Condensed Matter Physics. 2023. Vol. 26, №. 2. P. 23704: 1–8 (Scopus, Q4).

   (*Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки енергії електрона за наявності домішок на поверхні квантової точки, побудовано графічно усі залежності, проаналізовано результати на предмет узгодження з результатами теорії груп*).

3. Bilynskyi I., Leshko R., Leshko O., Terletska H., Pazuyk R., Voitovych Kh. Impurity states in non-concentric spherical core-shell quantum dot // Physics and Chemistry of Solid State. 2024. Vol. 25, № 1. P. 98-103 (Scopus, Q3).

   (*Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки енергії електрона та його хвильові функції у сферичній неконцентричній квантовій точці типу ядро-оболонка за наявності донорної домішки не у центрі наносистеми, побудовано графічно усі залежності*).

4. Leshko R. Ya., Bilynskyi I. V., Leshko O. V., Popov M. Yu., Ocheretyanyi A. O. Electron and hole energy spectrum of non-concentric spherical core-shell quantum dot under an externally applied electric field // Condensed Matter Physics. 2024. Vol. 27, №. 4. P.43703: 1–8 (Scopus, Q4).

   (*Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки енергії електрона та дірки та їхні хвильові функції, обчислено ширину оптичної щілини і її залежність від величини електричного поля, побудовано графічно усі залежності*).

5. Leshko R. Ya., Leshko O. V., Bilynskyi I. V., Pazyuk R. I. Electron-hole exchange interaction in the non-concentric spherical core-shell quantum dot // Journal of Physical Studies. 2025. Vol. 26, № 1. P. 1720:1-10 (Scopus, Q4).

(*Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки обмінної взаємодії як функції параметра неконцентричності квантової точки типу ядро-оболонка, побудовано графічно усі залежності*).

Наукові статті, опубліковані у періодичних наукових виданнях, проіндексованих у наукометричних базах даних Scopus та/або Web of Science Core Collection

1. Leshko R. Ya., Bilynskyi I. V., Leshko O. V., Slusarenko M. A. Electron energy spectrum of the non-concentric spherical core-shell quantum dot // Micro and Nanostructures. 2023. Vol. 181. P. 207615:1-8 (Scopus, Q2).
(*Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки енергії електрона та його хвильові функції, проведено порівняння результатів у граничних випадках переходу неконцентричної квантової точки у концентричну, побудовано графічно усі залежності*).
2. Leshko R. Ya., Leshko O. V., Bilynskyi I. V., Holskyi V. B. Optical absorption coefficient of non-concentric spherical core-shell quantum dot // Optics Communications. 2024. Vol. 566. P. 130722:1-5 (Scopus, Q2).
(*Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки оптичного коефіцієнта поглинання з врахуванням дисперсії за розташування ядра квантової точки, проведено порівняння з експериментальними даними, побудовано графічно усі залежності*).

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації

1. Leshko R., Leshko O. Interband and intraband electromagnetic wave absorption of non-concentric spherical core-shell quantum dots // VIII

Всеукраїнська науково-практична конференція MEICS-2023. Дніпро, 22-24 листопада 2023 р. С. 258-259.

(*Особистий внесок автора: обчислено коефіцієнт оптичного поглинання сферичної неконцентричної квантової точки типу ядро-оболонка, що зумовлений міжрівневими переходами електрона*).

2. Leshko O. V., Leshko R. Ya. Effect of electric field of the electron and hole energy spectra of non-concentric spherical core-shell quantum dot // XIX international Freik conference on physics and technology of thin films and nanosystems. Ivano-Frankivsk, October 09-14, 2023. P. 46.

   (*Особистий внесок автора: обчислено енергетичний спектр електрона і дірки та їхні хвильові функції у сферичній неконцентричній квантовій точці типу ядро-оболонка*).

3. Leshko R. Ya., Bilynskyi I. V., Leshko O. V. Interlevel absorption of electromagnetic waves of the non-concentric spherical core-shell quantum dot // International scientific and technical conference "Laser technologies. lasers and their application. LTLA-2023". Truskavets, Ukraine, Rzeszów, Poland, June 29 - June 30, 2023. P. 11.

   (*Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки оптичного коефіцієнта поглинання з врахуванням дисперсії за розташування ядра, проведено порівняння з експериментальними даними*).

4. Leshko R. Ya. Leshko O. V., Shypytyak T. E. Features of the electronic energy spectrum of non-concentric spherical core-shell quantum dots // IX Ukrainian scientific conference on physics of semiconductors (USCPS-9). Uzhhorod, Ukraine, May 22-26, 2023. P. 120.

   (*Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки енергетичного спектра електрона різними методами у сферичній неконцентричній квантовій точці типу ядро-оболонка, проведено*

порівняння коефіцієнтів поглинання для різних розмірів квантової точки).

5. Leshko R. Ya., Leshko O. V., Bilynskyi I. V. The influence of impurities and electric fields on light absorption by spherical non-concentric core-shell quantum dots // XI-th International Conference "Topical problems of semiconductor physics". Prykarpattya, Drohobych, Ukraine, May 27-31, 2024. P. 44.

   (*Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки енергетичного спектра домішки і досліджено зміни у спектральному коефіцієнті поглинання при зміні параметра неконцентричності сферичної квантової точки типу ядро-оболонка за наявності електричного поля і без нього).*

6. Bilynskyi I., Popov M., Leshko R., Leshko O. The doped non-concentic core-shell quantum dots under applied electric field // IX Всеукраїнська науково-практична конференція MEICS-2024. Дніпро, 27-29 листопада 2024 р. С. 271-272.

   (*Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки енергетичного спектра електрона за наявності домішки або електричного поля, побудовано всі графічні залежності*).

7. Лешко Р., Лешко О., Хомин П. Електронні і діркові енергетичні спектри сферичної неконцентричної квантової точки типу ядро-оболонка // «Лашкарьовські читання». Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників. Київ, 3-4 квітня 2025 р. С. 37-38.

   (*Особистий внесок автора: методом скінчених елементів проведено числові розрахунки енергетичного спектра електрона та дірки у сферичній неконцентричній квантовій точці типу ядро-оболонка, порівняно отримані результати з результатами, які отримано методом плоских хвиль, побудовано всі графічні залежності*).

Оцінка структури дисертації, її мови та стилю викладення

Мова і стиль дисертації відповідають вимогам, що висуваються до праць такого рівня. Зміст дисертації відповідає чинним вимогам до оформлення дисертації, встановленим освітньо-науковою програмою «Прикладна фізика та наноматеріали» галузі знань 10 «Природничі науки», спеціальності 105 «Прикладна фізика та наноматеріали». Нормативні вимоги щодо оформлення дисертації дотримані повністю.

Дисертаційна робота складається з переліку умовних скорочень, вступу, п'яти розділів, висновків та списку із 98 джерел використаної літератури, одного додатку. Повний обсяг дисертаційної роботи становить 172 сторінки, у тому числі містить 32 рисунки та 3 таблиці.

У ході обговорення дисертації не було висунуто зауважень щодо самої суті роботи.

Загальний висновок

Дисертаційна робота Лешко Ольги Володимирівни «Оптичні властивості сферичних неконцентричних квантових точок типу ядро-оболонка», подана на здобуття доктора філософії у галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 105 «Прикладна фізика та наноматеріали» за її актуальністю, науково-теоретичним рівнем, новизною постановки та розв'язання проблеми, практичним значенням отриманих результатів відповідає вимогам пунктів 6, 7, 8, 9 «Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії», затвердженого Постановою КМУ від 12.01.2022 р. №44 (зі змінами, внесеними згідно з Постановою КМУ №507

від 03.05.2024 р.). Дисертаційне дослідження містить обґрунтовані і достовірні висновки та результати.

За результатами публічної презентації результатів дисертації та їх обговорення на засіданні кафедри фізики та інформаційних систем факультету фізики, математики, економіки та інноваційних технологій Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка дисертацію Лешко О. В. рекомендовано до захисту в разовій спеціалізованій вченій раді для здобуття ступеня доктора філософії у галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 105 «Прикладна фізика та наноматеріали».

Голова засідання,
доктор фізико-математичних наук,
професор, декан факультету фізики,
математики, економіки та інноваційних
технологій, професор кафедри фізики
та інформаційних систем
Дрогобицького державного
педагогічного університету імені
Івана Франка Ігор СТОЛЯРЧУК

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка
Підпис
ЗАСВІДЧУЮ
вчений секретар вченої ради

Міністерство освіти і науки України
Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка
02125438