

РЕЦЕНЗІЯ
офіційного рецензента
Кавецького Тараса Степановича,
кандидата фізико-математичних наук, доцента,
доцента кафедри фізики та інформаційних систем
Дрогобицького державного педагогічного університету
імені Івана Франка
на дисертацію
Лешко Ольги Володимирівни
«Оптичні властивості сферичних неконцентричних квантових
точок типу ядро-оболонка»,
подану на здобуття наукового ступеня доктора філософії
зі спеціальності 105 Прикладна фізика та наноматеріали,
галузі знань 10 Природничі науки

У сучасній оптоелектроніці активно впроваджуються низькорозмірні наносистеми, серед яких квантові точки (КТ) типу ядро-оболонка, КТЯО, займають особливе місце завдяки своїм унікальним електронним і оптичним властивостям. Ці структури є незамінними компонентами в приладах нового покоління, таких як світловипромінювальні діоди, детектори випромінювання та сонячні концентратори. Застосування КТЯО дозволяє суттєво підвищити ефективність перетворення та керування світловою енергією. А це відкриває нові можливості для розробки більш продуктивних і стабільних оптоелектронних пристроїв. Зокрема, завдяки таким КТЯО зменшується небажане миготіння в діодах та покращується ефективність світлопоглинання в сонячних системах.

Актуальність дослідження полягає у тому, що у реальних умовах синтезу КТЯО часто є неконцентричними, тобто мають зміщене ядро відносно геометричного центру. Це явище спричинене як випадковими технологічними флуктуаціями, так і цілеспрямованими впливами, наприклад катіонним обміном. Така неконцентричність значно впливає на розподіл електронної густини,

енергетичні рівні та домішкові стани, що, у свою чергу, визначає ефективність оптичних процесів. Крім того, зовнішнє електричне поле відкриває додаткові можливості для керування просторовим розташуванням носіїв заряду в таких структурах, що дозволяє цілеспрямовано змінювати їхні фізичні характеристики.

У зв'язку з цим вивчення енергетичних спектрів електронів і дірок, домішкових станів, обмінної взаємодії та впливу параметра неконцентричності у КТ типу ядро-оболонка є актуальним як з точки зору фундаментальної науки, так і для подальшого розвитку практичних застосувань. Результати таких досліджень можуть слугувати теоретичною основою для створення високоефективних неблимаючих світлодіодів і люмінесцентних матеріалів для сонячних концентраторів нового покоління, які забезпечують високу стабільність та ефективність у перетворенні енергії.

Усі розділи дисертаційної роботи логічно пов'язані один з одним і відображають основні завдання, що виконано, і висновки.

У **вступі** сформульовано актуальність теми, мету й завдання дисертаційної роботи, показано її зв'язок із сучасними науковими напрямками у сфері нанофізики. Окреслено наукову новизну та практичне значення отриманих результатів, наведено відомості про апробацію та публікації.

У **розділі 1** проведено ґрунтовний аналіз літератури щодо багат шарових сферичних квантових точок, включаючи вплив домішок та зовнішніх полів. Виявлено відсутність послідовної теорії, яка враховує неконцентричність у квантових точках типу ядро-оболонка, що обґрунтовує вибір теми дослідження.

У **розділі 2** розроблено модель електронних та діркових станів неконцентричних сферичних квантових точок типу ядро-оболонка із застосуванням методу плоских хвиль та методу скінчених елементів. Обчислено енергетичні спектри та коефіцієнт поглинання, показано залежність цих характеристик від параметра неконцентричності й розмірів шарів.

Вплив водневоподібних домішок на електронні рівні у неконцентричних квантових точках досліджено у **розділі 3**. Показано зміну виродження та розщеплення енергетичних рівнів при різному розташуванні ядра й домішок, зокрема проаналізовано випадки однієї, двох, чотирьох і шести домішок.

У **розділі 4** в рамках моделі ефективної маси розвинуто теорію електронних та діркових станів у сферичних наночастинках з урахуванням поляризації та деформації. Визначено енергію обмінної взаємодії в залежності від радіуса оболонки та параметра неконцентричності, показано закономірності зміни розщеплення екситонних станів.

У **розділі 5** досліджено вплив зовнішнього електричного поля у поєднанні з неконцентричністю на енергетичні рівні та оптичні параметри. Показано можливість компенсації ефекту неконцентричності електричним полем і регулювання ефективної оптичної щільності сферичних квантових точок.

Надійність і достовірність отриманих результатів забезпечується використанням перевірених аналітичних і чисельних підходів теоретичної фізики, зокрема варіаційного методу, методу плоских хвиль і методу скінченних елементів для розв'язання рівняння Шредінгера. Узгодженість отриманих даних з результатами, наведеними в інших теоретичних та експериментальних дослідженнях, додатково підтверджує їхню достовірність.

Також вагомим аргументом на користь правильності проведених розрахунків є їхня добра збіжність із точними аналітичними розв'язками у граничних випадках для спрощених моделей, що дозволяє оцінити коректність застосованих методів.

Крім того, результати дослідження якісно й кількісно узгоджуються з наявними експериментальними даними, зокрема щодо положення смуг поглинання та величини зсуву Стокса в квантових точках типу ядро-оболонка, що ще раз підтверджує їхню наукову обґрунтованість.

Обґрунтованість наукових висновків, що наведені у дисертації Лешко О.В., підтверджується також достатньою кількістю наукових публікацій, зокрема всі статті опубліковано у журналах, що індексуються у наукометричній базі Scopus та/або Web of Science та дві з них мають квартилі Q1-Q2. Результати також представлялися та апробовані на семи всеукраїнських чи міжнародних наукових конференціях.

Наукова новизна дисертації полягає у тому, що вперше:

1. Розроблено універсальну аналітичну модель для опису електронних і діркових станів у сферичних неконцентричних квантових точках типу ядро-оболонка, яка дозволяє враховувати як збуджені стани, так і вплив зовнішніх електричних полів, що робить її придатною для аналізу спектральних властивостей та інтерпретації експериментальних даних.

2. Показано, що зміщення ядра квантової точки змінює енергетичну структуру системи, зокрема спричиняє розщеплення р-подібних рівнів, підвищення енергії основних станів і розширення смуг оптичного поглинання, що узгоджується з експериментальними даними.

3. Досліджено вплив донорної домішки у сферичній неконцентричній КТЯО і встановлено, що просторове розташування ядра відіграє домінуючу роль у формуванні енергетичного спектру порівняно з положенням домішки, а також виявлено умови, за яких частково відновлюється виродження енергетичних рівнів збуджених станів.

4. Показано, що поляризаційні ефекти і пружна деформація мають незначний вплив на енергетичну структуру екситонів у наносистемах із малим контрастом сталих ґратки та діелектричних проникностей, що дозволяє спростити моделювання таких структур.

5. Встановлено складний характер впливу просторової асиметрії та зовнішнього електричного поля на енергетичні рівні і обмінну взаємодію, зокрема продемонстровано можливість керування спектральними

властивостями КТЯО шляхом зміни геометрії (зміщення ядра, товщина оболонки) та електричного поля.

6. Визначено значення напруженості електричних полів, які можна прикладати до сферичної неконцентричної КТЯО, щоб отримати значення ефективної оптичної щільності таким, як і в концентричних КТЯО.

Зважаючи на отримані результати проведеного дослідження та підкреслюючи наукову важливість висновків дисертантки, варто звернути увагу на окремі **недоліки та зауваження**, які є предметом дискусії:

1. Оптичні коефіцієнти поглинання обчислено при низьких температурах. Який вплив температур може бути на зазначені коефіцієнти?

2. У роботі враховано дисперсію за розташуванням ядра КТЯО, однак нічого не згадується про дисперсію КТ за розмірами.

3. З наведеної класифікації наносистем у дисертаційній роботі проведено дослідження КТ першого типу. На скільки можна застосовувати запропоновану аналітичну теорію до квантових точок іншого типу, наприклад II типу чи інверсного I типу?

4. У тексті дисертаційної роботи інколи зустрічають деякі неточності, фізичні жаргони, граматичні та орфографічні описки.

Наведені вище **зауваження жодним чином не знижують** загальної позитивної високої оцінки дисертаційної роботи і не применшують значущості новизни та зроблених наукових висновків.

Результати дисертаційного дослідження опубліковані в 14 наукових роботах, з них: 7 статей у фахових журналах, що індексуються у базі Scopus/Web of Science (2 у зарубіжних журналах з кuartилями Q1-Q2, а 5 – у вітчизняних журналах з кuartилями Q3-Q4) та 7 робіт, що є матеріалами всеукраїнських чи міжнародних конференцій.

Дисертаційна робота Лешко Ольги Володимирівни «Оптичні властивості сферичних неконцентричних квантових точок типу ядро-оболонка», що

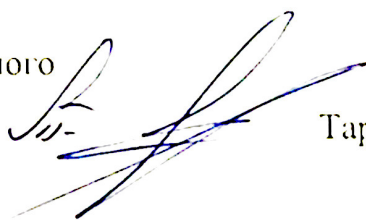
подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 105 «Прикладна фізика та наноматеріали» галузі знань 10 «Природничі науки», за її оформленням, актуальністю, науковим рівнем, змістом, рівнем новизни, практичним значенням отриманих результатів с завершеною науковою роботою, що відповідає усім вимогам щодо змісту та оформлення відповідних робіт (наказ МОН України «Про затвердження Вимог до оформлення дисертації» № 40 від 12 січня 2017 р., зі змінами та вимогам затвердженого постановою Кабінету Міністрів України «Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії» № 44 від 12 січня 2022 р.).

Вважаю, що авторка цієї дисертаційної роботи, Лешко Ольга Володимирівна, заслуговує на присудження їй ступеня доктора філософії за спеціальністю 105 «Прикладна фізика та наноматеріали» галузі знань 10 «Природничі науки».

Офіційний рецензент:

кандидат фізико-математичних наук,
доцент, доцент кафедри фізики та
інформаційних систем

Дрогобицького державного педагогічного
університету імені Івана Франка



Тарас КАВЕЦЬКИЙ

