

РЕЦЕНЗІЯ
офіційного рецензента
Кузика Олега Васильовича,
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

Дисертація Лешко Ольги Володимирівни присвячена теоретичному дослідженню сферичних неконцентричних квантових точок виду ядро-оболонка (СНКТЯО). Саме квантові точки виду ядро-оболонка (КТЯО) добре зарекомендували себе у створенні неблимаючих світлодіодів та є ефективними люмінесцентними центрами у сонячних концентраторах. Поширені та низьковартісні колоїдні методи отримання КТЯО не гарантують абсолютної сферичності на концентричності форми. Завжди існують об'єктивні різноманітні причини, що зумовлюють порушення концентричності. Тому дослідження електронних і діркових станів у СНКТЯО є важливим та актуальним завданням. А одночастинкові стани у наносистемах у більшості випадків визначають інші властивості таких систем, зокрема й оптичні властивості зазначених квантових точок (КТ). Тому, беручи до уваги наведене вище, вважаю, що матеріал цієї дисертаційної роботи є **актуальним і значущим**.

Про актуальність дисертаційного дослідження свідчить і те, що частина його прикладних результатів були отримані при виконанні наступних науково-дослідних тем:

- Вплив зовнішніх полів на синтез, сенсорні властивості квантових точок для медичних застосувань в умовах війни (номер держреєстрації 0124U001093);
- Біонаноконструкції напівпровідникова квантова точка – протеїн для біомедичних застосувань: синтез, дослідження, характеристика з використанням машинного навчання (номер держреєстрації 0125U002002).

Зміщення ядра відносно оболонки впливає на оптичні властивості сферичних КТЯО. Виявлена залежність оптичних характеристик від параметра неконцентричності дозволить здійснювати їх прогнозування. Це важливо для створення невидимих світлодіодів, інфрачервоних і терагерцових детекторів. Встановлені закономірності впливу домішок на енергетичні рівні у ШКТЯО дають змогу зменшити вплив домішок і підвищити стабільність пристроїв на основі таких матеріалів. Виявлений вплив неконцентричності та електричного поля сприяє розробці ефективних люмінесцентних центрів для сонячних концентраторів і фотоніки, що має значення для енергетики та нанотехнологій. Тому керування оптичними характеристиками за допомогою електричного поля дозволяє контролювати положення енергетичних рівнів, ймовірність рекомбінації носіїв заряду та їхню взаємодію з електромагнітним випромінюванням. Це, своєю чергою, дає змогу налаштовувати спектральні характеристики та підвищувати ефективність оптоелектронних приладів. З огляду на це, результати дисертації мають як **теоретичну, так і практичну цінність.**

Кожен із розділів основної частини роботи включає теоретичне обґрунтування досліджуваної проблеми, проведення чисельних розрахунків, детальний аналіз отриманих результатів та формулювання

відповідних висновків. Далі наведено узагальнений опис змісту кожного розділу.

У **розділі 1** подано літературний огляд, де зазначено важливість використання КТЯО, можливості отримання СНКТЯО, класифіковано наносистеми за типом матеріалів, формою, взаємним розміщенням зон. Також авторка роботи описала наявні теорії, що застосовуються до сферичних концентричних КТЯО. Як підсумок розділу зазначено, що станом на сьогодні відсутня теорія опису СНКТЯО.

У **другому розділі** розвинуто аналітичну теорію, що дає змогу описати електронні та діркові стани у СНКТЯО. Теорія ґрунтується на використанні методу розкладу за плоскими хвилями. У межах такого підходу отримано аналітичні вирази для всіх матричних елементів. У результаті застосування теорії обчислено електронні та діркові стани у СНКТЯО та оптичні коефіцієнти поглинання електромагнітних хвиль, які зумовлені міжрівневими та міжзонними квантовими переходами. Також у цьому розділі враховано статистичний розподіл КТЯО за параметром неконцентричності, що дало змогу обчислити оптичний коефіцієнт поглинання та порівняти його з експериментальними даними. У результаті порівняння встановлено якісне та кількісне узгодження результатів. Правильність отриманих результатів також підтверджується порівнянням їх із результатами, одержаними чисельним методом скінчених елементів.

У **третьому розділі** розглянуто вплив нецентральної донорної домішки на енергію електрона у СНКТЯО. Використовуючи метод плоских хвиль і пропоновану у розділі 1 методику, обчислено енергетичні рівні електрона як функції розташування домішки та параметра неконцентричності. Показано, що при протилежному розташуванні домішки та ядра КТЯО відбувається взаємна компенсація їх впливів на енергетичні рівні

електронів. У таких випадках спостерігається відновлення сферичного розподілу електронної густини ймовірності.

Розділ 4 присвячений аналізу впливу поляризаційних зарядів та деформації на гетеромежі КТ-матриця на електронні й діркові стани квантової точки. На прикладі КТ InAs/GaAs показано, що у випадку, коли діелектрична проникність матеріалу КТ більша, ніж матеріалу матриці, то поляризаційні заряди збільшують енергію електрона. І навпаки, деформація, що виникає на межі КТ-матриці, призводить до зменшення енергії електрона. Ці два ефекти впливають аналогічним чином на обмінну взаємодію між електронами та дірками, що визначає зсув Стокса у КТ. Таким чином, діючи в протилежних напрямках, ефекти поляризації та деформації компенсують свій вплив на електронні та діркові стани. Тому для гетеросистем, у яких різниця діелектричних проникностей і неузгодження ґраток є незначними, їхнім впливом можна знехтувати. Саме це й зроблено для СНКТЯО CdSe/CdS/матриця. Для цієї гетеросистеми обчислено електрон-діркову обмінну взаємодію та її залежність від параметра неконцентричності. Розраховані теоретичні дані узгоджуються з даними експерименту з розщеплення темних і світлих станів екситона.

У **п'ятому розділі** досліджено вплив електричного поля на електронні та діркові стани СНКТЯО. Зокрема, проаналізовано вплив електричного поля на ефективну ширину оптичної щілини. Показано, що електричним полем можна регулювати ефективну ширину оптичної щілини, зокрема досягти її значення, характерного для сферичної концентричної КТЯО.

Наукові положення, які представлені в дисертаційній роботі, є добре обґрунтованими, а також належно висвітлені у відповідних розділах дисертації.

Отримані наукові результати повною мірою відповідають меті та завданням дисертаційної роботи. Вони обговорювались на наукових

міжнародних конференціях та опубліковані у фахових виданнях України й закордонних виданнях, які індексуються у базах даних Web of Science Core Collection та/або Scopus, у тому числі дві статті в журналах квартиля Q2.

Достовірність отриманих результатів ґрунтується на використанні загальноприйнятих теоретичних підходів і методів дослідження та не викликає жодних сумнівів. Також достовірність отриманих результатів підтверджується добрим узгодженням теоретичних результатів, отриманих у межах цього дисертаційного дослідження, з експериментальними даними інших дослідників.

Наукова новизна дисертації полягає в тому, що **вперше**:

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

2) запропоновану теорію застосовано до обчислення оптичного коефіцієнта поглинання у СНКТЯО з урахуванням дисперсії параметра неконцентричності;

3) встановлено залежності енергетичних рівнів електрона у СНКТЯО за наявності нецентральної донорної домішки, отримано чергування розщеплення та виродження електронних рівнів збуджених станів при зміні параметра неконцентричності й розташування домішки;

4) проведено розрахунки розщеплення темних і світлих екситонних станів у концентричній КТ з урахуванням деформації та поляризації на межі КТ–матриця. Їхній вплив враховано у сумарному вкладі. На основі отриманих результатів встановлено залежність енергії розщеплення у сферичній КТЯО як функцію параметра неконцентричності;

5) обчислено залежність ефективної оптичної щільності від величини прикладеного електричного поля у СНКТЯО. Показано, як можна регулювати значення ефективної оптичної щільності електричним полем у СНКТЯО.

Не дивлячись на високий рівень дисертаційного дослідження та значний науковий доробок її авторки, доцільно зробити наступні зауваження:

- 1) У роботі розглядається неконцентричність, яка обумовлена зміщенням центрів ядра, домішки та оболонки вздовж однієї осі (тобто зберігається осьова симетрія). Така постановка задачі є виправданою з огляду на можливість отримання аналітичних результатів та значно спрощує розрахунки. Водночас у реальних КТ неконцентричність, очевидно, має тривимірний характер. Тому залишається відкритим питання, як пониження симетрії розташування ядра та домішки відносно оболонки вплине на досліджувані ефекти.
- 2) У дисертаційній роботі досліджено вплив дисперсії параметра неконцентричності на високоенергетичні міжзонні переходи, що визначають оптичні властивості наноструктур. Водночас вплив цього параметра на низькоенергетичні міжрівневі переходи, які характеризують внутрішньозонні процеси, у роботі не розглянуто.
- 3) У дисертації не вказано, як результати методу скінчених елементів узгоджуються з методом плоских хвиль для випадку прикладеного електричного поля.

Зазначені **зауваження не впливають** на висновок про високий науковий рівень дисертаційного дослідження та його загальну позитивну оцінку. Отримані результати опубліковані в 14 наукових роботах, з яких 7 статей (2 з них у журналах кuartилів Q1–Q2 та 5 – у журналах кuartилів Q3–Q4) і 7 робіт, представлених у матеріалах конференцій.

Дисертаційна робота Лешко Ольги Володимирівни є завершеним науковим дослідженням, яке виконане на високому теоретичному рівні. Авторка отримала низку нових, достовірних, науково обґрунтованих та

підтверджених результатів, які становлять значний інтерес як для фундаментальної науки, так і для практичного застосування. Представлений авторкою аналіз дозволяє глибше зрозуміти фізичну природу вивчених явищ і процесів у СНКТЯО. Усі висновки добре теоретично обґрунтовані й мають чітке методологічне підґрунтя.

Дисертаційна робота Лешко Ольги Володимирівни «Оптичні властивості сферичних неконцентричних квантових точок типу ядро-оболонка», що подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії з галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 105 «Прикладна фізика та наноматеріали», за своєю актуальністю, науковим рівнем, новизною, практичним значенням отриманих результатів та системністю подачі матеріалу, 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 Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022 р. №44 (зі змінами, внесеними згідно з Постановами КМУ №341 від 21.03.2022, №502 від 19.05.2023, №507 від 03.05.2024).

Авторка дисертації, Лешко Ольга Володимирівна, заслуговує на присудження ступеня доктора філософії з галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 105 «Прикладна фізика та наноматеріали».

Рецензент:

кандидат фізико-математичних наук,
доцент, доцент кафедри фізики
та інформаційних систем
Дрогобицького державного педагогічного
університету імені Івана Франка

Олег КУЗИК

