

ВІДГУК

офіційного опонента
Сеті Юлії Олександрівни,
доктора фізико-математичних наук, професора,
професора кафедри прикладної математики
Національного університету «Львівська політехніка»
на дисертаційну роботу
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»

Актуальність дисертаційної роботи

У сучасній оптоелектроніці значну увагу приділяють наноструктурам, зокрема квантовим точкам типу ядро-оболонка (КТЯО), які завдяки своїм унікальним електронним та оптичним властивостям демонструють високу ефективність у світловипромінювальних діодах, сонячних елементах, детекторах випромінювання, квантовій оптиці та біомедичних застосуваннях. Особливий інтерес становлять сферичні КТЯО з просторовим розділенням носіїв заряду, що забезпечує підвищення стабільності люмінесценції, зменшення оптичного миготіння, а також покращення енергетичної конверсії.

Однак більшість досліджень виконано для ідеалізованих концентричних систем, хоча у реальних умовах синтезу часто формуються сферичні неконцентричні квантові точки типу ядро-оболонка (СНКТЯО), в яких ядро зміщене відносно геометричного центру. Порушення сферичної симетрії впливає на локалізацію носіїв заряду, спектр енергетичних рівнів електронів і дірок, оптичний коефіцієнт поглинання, зсув Стокса, розщеплення темних і

світливих екситонних станів. Особливої складності набуває аналіз таких систем за наявності домішок, які, завдяки енергетично вигідному розташуванню, додатково модифікують спектральні властивості квантових точок (КТ).

Важливо зазначити, що вплив зовнішнього електричного поля на СНКТЯО також відрізняється від впливу на концентричні аналоги: просторовий розподіл заряду в неконцентричній структурі призводить до додаткового зміщення спектрів поглинання та випромінювання. Це відкриває нові можливості керування оптичними властивостями для практичних застосувань.

Аналіз існуючих теоретичних робіт свідчить про добре розвинену модельну базу для концентричних КТ, зокрема в межах методу ефективної маси та прямокутного потенціалу. Водночас, теоретичні дослідження неконцентричних КТ залишаються неповними, і не існує аналітичної теорії для опису одночастинкових і збуджених станів у таких системах з урахуванням домішок та зовнішніх полів.

У зв'язку з цим, актуальним є розроблення послідовного підходу до теоретичного опису сферичних неконцентричних КТЯО, який дозволяє дослідити вплив параметра неконцентричності, домішок та електричного поля на електронні, діркові та екситонні стани, а також на їх оптичні характеристики. Такі дослідження є важливими як для фундаментального розуміння процесів у складних наноструктурах, так і для практичного використання в оптоелектроніці, фотоніці та сенсорних технологіях нового покоління.

Зв'язок теми дисертаційної роботи з науковими планами, програмами, фундаментальними та прикладними дослідженнями

Дисертаційна робота відповідає науковими напрямкам діяльності кафедри фізики та інформаційних систем Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка. Основні результати дослідження були

отримані дисертанткою в межах реалізації наукових тем: “Фотополімерні матриці та наноносії при конструюванні біосенсорів для моніторингу стану довкілля та якості питної води”, “Вплив зовнішніх полів на синтез, сенсорні властивості квантових точок для медичних застосувань в умовах війни”, а також “Біонанокомплекси напівпровідникова квантова точка – протеїн для біомедичних застосувань: синтез, дослідження, характеристика з використанням машинного навчання”.

У рамках перелічених наукових тем було проведено теоретичні дослідження електронних і діркових станів у СНКТЯО, обчислено спектр оптичного поглинання, а також вивчено локалізацію темних і світлих екситонних станів. Ураховано вплив домішок і зовнішніх електричних полів на електронні і діркові енергетичні рівні.

Ступінь обґрунтованості та достовірності наукових положень, висновків і рекомендацій

Отримані наукові результати та висновки мають високу ступень достовірності через використання добре відомих методів квантової механіки, зокрема варіаційного методу, методу розкладу за плоскими хвилями та чисельного методу скінчених елементів.

Отримані результати для СНКТЯО узгоджуються з результатами, що отримані для концентричних систем у граничному випадку прямування до нуля параметра неконцентричності.

Ще одним доказом достовірності отриманих результатів є добре якісне та кількісне їхнє співпадіння з експериментальними даними інших авторів.

Достовірність висновків, що подані у дисертації Лешко О. В., забезпечується також публікаціями результатів у журналах, які індексуються у базах Scopus та/або Web of Science (два з них мають квартилі Q2), та їх доповідями на всеукраїнських і міжнародних наукових конференціях.

Новизна наукових положень, висновків і рекомендацій, сформульованих у дисертації

До основних наукових результатів проведеного дослідження варто віднести такі:

1. Побудовано теорію одночастинкових станів електронів і дірок у СНКТЯО з урахуванням порушення сферичної симетрії через неконцентричність структур.

2. Встановлено залежності оптичного коефіцієнта поглинання від параметра неконцентричності, що дозволяє враховувати геометричні особливості КТ при моделюванні їх оптичних властивостей.

3. Проаналізовано вплив донорної домішки на просторову локалізацію та енергетичний спектр електронних станів у СНКТЯО.

4. Вперше досліджено одночасний вплив поляризаційних зарядів і деформаційних ефектів на межі КТ-матриця на розщеплення темних і світлих екситонних станів. Здійснено розрахунок розщеплення темних і світлих екситонних станів у СНКТЯО.

5. Досліджено вплив зовнішнього електричного поля на електронні та діркові стани й оптичну щілину в СНКТЯО, виявлено зміну просторової локалізації носіїв заряду та додаткове розщеплення спектральних ліній за рахунок порушення концентричності та наявності електричного поля.

Теоретична цінність і практична значущість результатів дисертаційного дослідження

Теоретична цінність дисертаційної роботи полягає у розвитку аналітичної теорії, яка описує електронні, діркові та екситонні стани в СНКТЯО з урахуванням впливу домішок, зовнішніх електричних полів, поляризаційних ефектів та деформацій. Запропонований підхід дозволяє моделювати просторову локалізацію носіїв заряду в умовах асиметрії структури, що

забезпечує можливість прогнозування і керування спектральними характеристиками наноструктур. Розраховані залежності оптичного коефіцієнта поглинання, а також розщеплення темних і світлих екситонних станів можуть бути використані при проектуванні наноструктур із заданими оптичними властивостями. Отримані результати розширюють теоретичну базу для дослідження неконцентричних КТЯО і можуть бути адаптовані до інших геометрій та типів наноструктур. Отже, дисертаційна робота робить вагомий внесок у розвиток сучасної теоретичної нанофізики та оптоелектроніки.

Повнота викладення наукових результатів дисертації в опублікованих працях

Дисертаційне дослідження повністю відображає результати, що обліковані у наукових працях: 7 статей (усі сім статей видані у фахових фізичних журналах, які індексуються базами Scopus/Web of Science, дві роботи – у журналах з кuartилями Q1-Q2, п'ять – у журналах з кuartилями Q3-Q4, п'ять статей у вітчизняних журналах, дві – у зарубіжних) та 7 робіт, що є матеріалами всеукраїнських чи міжнародних конференцій.

Відсутність порушення академічної доброчесності

У дисертаційній роботі дотримано принципів академічної доброчесності: плагіату, фабрикацій та фальсифікацій не виявлено, усі використані джерела коректно процитовано. Авторський внесок у публікаціях, виконаних у співавторстві, чітко визначено та належно зазначено.

Відповідність дисертаційної роботи встановленим вимогам

Дисертаційне дослідження Лешко Ольги Володимирівни, подане до розгляду, містить усі необхідні складові, зокрема: список умовних скорочень, вступ, п'ять основних розділів, висновки, перелік використаних джерел та

додаток. Робота написана українською мовою з дотриманням усіх вимог наукового стилю і норм. Матеріал подано послідовно й структуровано, при цьому чітко простежується логічний взаємозв'язок між розділами.

Повнота викладення наукових результатів дисертації в опублікованих наукових працях відповідає вимогам, що ставляться до дисертацій на здобуття наукового ступеня доктора філософії, та визначені у «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 №44 від 12 січня 2022 року з усіма змінами.

Зауваження та дискусійні положення дисертації

Читаючи та аналізуючи дисертаційну роботу виникають деякі питання і зауваження:

1. Чи можна поширити запропоновану теорію СНКТЯО на відкриті КТ?
2. У роботі враховано перехідний шар, де діелектрична проникність змінюється плавно, однак ефективні маси змінюються стрибкоподібно. Чим це обумовлено?
3. У розділі 4 наведено графіки енергії розщеплення темних і світлих екситонних станів у рамках простої параболічної зони провідності і валентної зони, а відповідних графіків з використанням багатозонної моделі валентної зони не представлено.
4. У дисертації трапляються поодинокі граматичні та орфографічні неточності, які не впливають на змістовність викладеного матеріалу.

Наведені вище зауваження **жодним чином не впливають** на загальну позитивну оцінку дисертаційної роботи, її висновків і змістовність викладу матеріалу.

Загальний висновок

Дисертаційна робота Лешко Ольги Володимирівни «Оптичні властивості сферичних неконцентричних квантових точок типу ядро-оболонка», що подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії у галузі знань 10 – «Природничі науки» за спеціальністю 105 – «Прикладна фізика та наноматеріали», відзначається високим науковим рівнем, актуальністю, науковою новизною, практичним значенням отриманих результатів і повнотою їх апробації. Робота відповідає вимогам, визначеним пунктами 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 № 341 від 21.03.2022, №502 від 19.05.2023 № 507 від 03.05.2024).

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

Офіційний опонент:

доктор фізико-математичних наук,
професор,
професор кафедри прикладної математики
Національного університету
«Львівська політехніка»

Юлія СЕТІ

