

## **ВИСНОВОК**

**про наукову новизну, теоретичне і практичне значення  
результатів дисертації Бандури Галини Ярославівни на тему:**

**«Електронні та діркові стани невзаємодіючих  
квантових точок та їх впорядкованих масивів»,**

**що подається на здобуття ступеня доктора філософії  
за спеціальністю 105 Прикладна фізика та наноматеріали  
галузі знань 10 Природничі науки**

### **Актуальність теми дисертації**

У сучасній фізиці напівпровідників та низьковимірних систем на їх основі одна з ключових ролей відводиться наноструктурам з квантовим обмеженням, серед яких домінують квантові точки (КТ) та їхні впорядковані масиви. Завдяки дискретному енергетичному спектру та можливості гнучкого керування електронними й оптичними властивостями, такі системи є фундаментальною основою для елементної бази новітньої фотоніки, лазерної техніки та квантових інформаційних технологій. Зростаючі вимоги до ефективності оптоелектронних приладів, зокрема сонячних елементів третього покоління, зумовлюють необхідність створення наноматеріалів із наперед заданими характеристиками, що неможливо без глибокого розуміння квантово-механічних процесів у таких гетероструктурах.

Особливої ваги набуває проблема адекватного теоретичного опису діркових станів, яка вимагає виходу за межі спрощених однозонних моделей через складну структуру валентної зони та ефекти змішування станів. Не менш важливим є врахування конкуруючих впливів пружної деформації та поляризації на гетеромежі, особливо для сильно неузгоджених систем типу InAs/GaAs. Розуміння механізмів прояву цих ефектів, а також впливу домішкових центрів і зовнішніх електричних полів

на енергетичні спектри носіїв заряду, відкриває перспективи для точного інженерного налаштування оптичних властивостей та мінімізації втрат у реальних нанoeлектронних пристроях.

Дослідження впорядкованих масивів КТ (надграток) зі складною структурою елементарної комірки є актуальним завданням у контексті розробки високоефективних фотоперетворювачів. Реальні технології вирощування часто призводять до формування структур, де сусідні КТ відрізняються за розміром або матеріалом, що суттєво трансформуює мінізонний спектр електронів і дірок. Отже, побудова теорії таких надграток, яка дозволяє прогнозувати положення та ширину мінізон, є важливою як для розвитку фізики низькорозмірних систем, так і для практичного проектування нових матеріалів із керованим тунелюванням та поглинанням.

Отже, теоретичне моделювання діркових станів з одночасним урахуванням деформацій, поляризації та впливу домішок у зовнішніх полях є необхідним для розуміння фізики реальних КТ та керування їхніми характеристиками. Разом з тим, побудова теорії мінізон у надгратках зі складним базисом (двома типами КТ) дасть змогу краще прогнозувати коефіцієнт корисної дії сонячних елементів на їхній основі та оптимізувати параметри таких структур.

### **Зв'язок теми дисертації з державними програмами, науковими напрямками 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. “Фотополімерні матриці та наноносії при конструюванні біосенсорів для моніторингу стану довкілля та якості питної води” (2021–

2023; державний реєстраційний номер 0121U109539).

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

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

Та кафедральної теми: “Отримання та дослідження фізичних властивостей наноконпозитних матеріалів на основі широкозонних напівпровідників” (2022–2025 роки).

### **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 Бандури Г. Я. є результатом самостійних досліджень здобувачки і не містить елементів плагіату та запозичень. Використані ідеї, результати і тексти інших авторів мають посилання на відповідне джерело.

Авторкою особисто проведено вибір та обґрунтування фізичних моделей, виконано математичні розрахунки енергетичних спектрів носіїв заряду в ізольованих КТ та їх масивах. Дисертантка самостійно розробила програмне забезпечення для чисельного моделювання впливу деформації, поляризації та зовнішніх полів на стан дірки, а також провела аналіз мінізонної структури надґраток зі складним базисом. Усі наукові результати, що виносяться на захист, отримані авторкою особисто або за її безпосередньої участі у постановці завдань та інтерпретації даних. 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 у дисертації результатів забезпечується використанням фундаментальних законів квантової механіки та апробованих методів фізики твердого тіла. В основі проведених досліджень лежить багатозонна теорія ефективної маси (моделі Латінджера-Кона), а також методи сильного зв'язку та плоских хвиль, які є загальновизнаними у світовій науковій практиці для опису наноструктур. Обґрунтованість висновків та рекомендацій підтверджується як внутрішньою узгодженістю отриманих аналітичних виразів та результатів чисельного моделювання, так і коректним переходом результатів у граничні випадки (наприклад, перехід багатозонної моделі в однозонну при зміні параметрів гетеросистеми), що узгоджується з відомими теоретичними даними інших авторів. Достовірність наукових положень також підтверджується позитивною оцінкою результатів міжнародною науковою спільнотою під час апробації на конференціях та публікацією матеріалів у рецензованих виданнях, що індексуються у міжнародних наукометричних базах Scopus та Web of Science. Запропоновані автором моделі та методичні підходи пройшли ретельну перевірку на відповідність сучасним уявленням фізики наносистем.

## **Ступінь новизни основних результатів дисертації порівняно з відомими дослідженнями аналогічного характеру**

Наукова новизна одержаних результатів полягає у тому, що вперше:

- 1) встановлено кількісні внески ефектів пружної деформації та поляризації на гетеромежі КТ–матриця в енергію діркових станів; зокрема доведено, що у гетеросистемі InAs/GaAs ці впливи мають протилежні знаки і практично повністю компенсують один одного для КТ радіусом понад 40 Å;

- 2) визначено межі застосовності багатозонних моделей (4x4 та 6x6) порівняно з однозонним наближенням для різних типів гетероструктур; показано, що нехтування змішуванням підзон у малих КТ призводить до похибки у визначенні енергії основного стану дірки до 33%;
- 3) доведено існування критичних значень зовнішнього електричного поля, при яких відбувається часткове відновлення сферичної симетрії розподілу густини носіїв заряду у КТ, порушеної внаслідок нецентрального розташування акцепторної домішки;
- 4) виявлено закономірності трансформації спектрального коефіцієнта поглинання КТ з акцепторною домішкою під дією електричного поля довільної орієнтації, що проявляється у керованому розщепленні піків, зумовлених переходами між станами з різними проєкціями повного моменту  $|M|=3/2$  та  $|M|=1/2$ ; показано, що величина напруженості електрооптичного поля сильніше впливає на висоту і розташування смуг поглинання, ніж напрямок електричного поля;
- 5) розроблено аналітичну модель мінізонного спектру для впорядкованих масивів КТ (лінійних, плоских та об'ємних) зі складним базисом, що містить дві різні за розміром або матеріалом квантові точки у примітивній комірці надгратки КТ;
- 6) встановлено, що наявність неоднорідності в базисі надгратки КТ призводить до розщеплення основної електронної мінізони на дві підзони (верхню та нижню), причому ширина верхньої зони завжди перевищує ширину нижньої за будь-яких параметрів тунельного зв'язку.

### **Теоретичне та практичне значення результатів дисертації.**

#### **Використання результатів роботи**

Теоретичне значення дисертації полягає в удосконаленні багатозонної теорії ефективної маси при опису станів носіїв заряду в напівпровідникових наноструктурах. Розроблений авторкою комплексний

підхід дозволяє одночасно враховувати вплив деформації, поляризації, домішкових центрів та зовнішніх електричних полів на енергетичні спектри дірок. Обґрунтування меж застосовності моделей Латтінджера-Кона, а саме 4x4 та 6x6, створює надійну базу для вибору адекватних математичних методів при дослідженні гетеросистем InAs/GaAs та GaAs/GaAlAs. Отримана теорія мінізонного спектру надґраток зі складним базисом поглиблює фундаментальні уявлення про енергетичну структуру періодичних наноб'єктів та механізми тунельного переносу заряду між неоднорідними КТ.

Практична цінність результатів полягає у можливості їх використання для розробки та оптимізації конкретних приладів нанофотоніки. Зокрема, розраховані параметри мінізон у неоднорідних надґратках дозволяють конструювати сонячні елементи, де за рахунок тунелювання між різними КТ можна підняти ККД перетворення енергії. Крім того, виявлені ефекти впливу електричного поля на інтенсивність та положення піків поглинання дають інструмент для створення перестроюваних квантових сенсорів та детекторів, характеристики яких можна динамічно змінювати прикладеним полем.

Результати дослідження плануються впроваджуватися в науковий та навчальний процеси Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка при підготовці фахівців у галузі прикладної фізики та наноматеріалів. Отримані результати та розроблені алгоритми розрахунку можуть бути використані академічними установами для прогнозування властивостей новітніх гетероструктур перед їх синтезом, що дозволяє оптимізувати параметри нанокомпозитів та зменшити витрати на експериментальні дослідження.

## **Перелік наукових праць, які відображають основні результати дисертації**

Результати дисертаційного дослідження опубліковані в 13 наукових роботах, з них: 5 статей (4 індексуються у базі Scopus/Web of Science, а з них 2 у журналах з квантилями Q1-Q2 і 2 - у журналах з квантилями Q3-Q4; 1 — у журналі категорії Б) та 8 робіт, що є матеріалами всеукраїнських і міжнародних конференцій.

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

- 1 Bilynskiy I., Leshko R., Bandura H. Influence of quantum dot shape on energy spectra of three-dimensional quantum dots superlattices. *Physics and Chemistry of Solid State*. 2020. Vol. 21, No 4. P. 584-590.  
(Особистий внесок автора: розраховано енергії мінізон, визначено їхні ширини).
- 2 Bilynskiy I., Leshko R., Bandura H. Electron and hole spectrum taking into account deformation and polarization in the quantum dot heterostructure InAs/GaAs. *Physics and Chemistry of Solid State*. 2023. Vol. 24, No 1. P. 146-152.  
(Особистий внесок автора: розраховано енергію електрона та дірки в рамках однозонної та багато зонних моделей ефективної маси, проведено порівняння результатів моделей).

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

- 3 Leshko R. Ya., Bandura H. Ya., Bilynskiy I. V., Karpyn A.V., Kvyk M.V., Melnyk Ya.Yu., Ocheretyanyi A.O., Popov M.Yu. Effect of arbitrarily

directed electric field on hole spectra and absorption in a quantum dot with off-center impurity. *Physics Letters A*. 2025. Vol. 559. P. 130898:1-8.

(*Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки енергетичних спектрів і коефіцієнтів поглинання*).

- 4 Leshko R., Bandura H., Bilynskiy I., Slusarenko M. The band structure of a chain of periodically ordered different quantum dots. *Physica B: Condensed Matter*. 2024. Vol. 690. P. 416272:1-5.

(*Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки зонної структури, побудовано графічно усі залежності*).

**Наукові статті, опубліковані у виданнях, що входять до списку наукових фахових видань України категорії Б**

- 5 Leshko R. Ya., Bandura H. Ya., Bilynskiy I. V., Melnyk Ya. Yu., Kvyk M. V. The intersubband optical absorption coefficient of the QD with acceptor impurity under applied electric field. *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*. 2024. Vol. 21, No 4. P. 14-24.

(*Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки коефіцієнта поглинання у КТ з акцепторною домішкою за наявності незмінного зовнішнього електричного поля*).

**Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації**

- 6 Bilynskiy I.V., Leshko R.Ya., Bandura H.Ya. The dependence of energy on the QD deformation and polarization charges. *XVII International Freik Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems*. Ivano-Frankivsk, October 11-16, 2021. P. 11.

(*Особистий внесок автора: обчислено енергію електрона та дірки у квантовій точці з урахуванням деформації та поляризації на межі квантова точка-матриця*).

- 7 Bilynskiy I.V., Leshko R.Ya., Bandura H.Ya. Miniband energy spectrum of quantum dot chains containing two different quantum dot in basis IX

*Ukrainian Scientific Conference on Physics of Semiconductors. Uzhhorod, Ukraine, May 22-26, 2023. P. 217.*

*(Особистий внесок автора: обчислено залежність енергії мінізон надґратки з квантових точок від хвильового вектора та розмірів квантових точок).*

- 8 Bilynskiy I.V., Leshko R.Ya., Bandura H.Ya. Theory of Superlattices with Two Atoms in the Basis. *XIX international Freik Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems. Ivano-Frankivsk, October 9-14, 2023. P. 84.*

*(Особистий внесок автора: отримано енергетичні мінізони надґратки квантових точок з двома квантовими точками у примітивній комірці надґратки).*

- 9 Bandura H., Bilynskiy I. Dependence of the intersubband optical absorption coefficient on the direction of the electric field in the GaAs/AlAs quantum dot heterostructure in the presence of an impurity. *VIII Всеукраїнська науково-практична конференція MEICS-2024. Дніпро, 27-29 листопада 2024 р. С. 274-275.*

*(Особистий внесок автора: обчислено оптичний коефіцієнт поглинання, зумовлений міжрівневими переходами дірки у квантовій точці в електричному полі за наявності домішки).*

- 10 Bandura H.Ya., Bilynskiy I.V. The influence of the electric field and the position of the acceptor on the energy spectrum and the intersubband optical absorption coefficient in the GaAs/AlAs quantum dot heterostructure. *Materials and Abstracts of Reports Presented at the International Conference (for the 100th anniversary of the birth of Professor Yu.M. Lomsadze). Uzhhorod, December 17-19, 2024. P. 221-222.*

*(Особистий внесок автора: обчислено залежність коефіцієнта поглинання, зумовленого міжрівневими переходами дірки у квантовій*

точці в електричному полі за наявності домішки, від величини електричного поля і розмірів квантової точки).

- 11 Bilynskiy I.V., Leshko R.Ya., Bandura H.Ya. An ordered array with two different quantum dots in a unit cell. *XI-th International Conference Topical Problems of Semiconductor Physics*. Drohobych, May 27-31, 2024. P. 58.

(Особистий внесок автора: обчислено ширини мінізон надгратки з квантових точок).

- 12 Bandura H. Ya., Bilynskiy I.V. Dependence of the energy spectrum of a quantum dot with an acceptor impurity on the angle of inclination of the electric field. «*Lashkaryov's readings*». *Young Scientists Conference on Semiconductor Physics*. Kyiv, April 3-4, 2025. P. 35-36.

(Особистий внесок автора: обчислено залежність енергетичного спектру дірки акцепторної домішки у квантовій точці від напрямку прикладання електричного поля).

- 13 Bandura H. Ya., Leshko R. Ya., Bilynskiy I.V. The energy spectra and band characteristics of two- and threedimensional superlattices of inhomogeneous quantum dots // *XX International Freik Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems*. Ivano-Frankivsk, October 06-10, 2025. P. 74.

(Особистий внесок автора: теоретично виведено і розраховано енергетичні спектри електрона у дво- і тривимірній надгратці з квантових точок).

### **Оцінка структури дисертації, її мови та стилю викладення**

Мова і стиль дисертації відповідають вимогам, що висувуються до праць такого рівня. Текст написаний професійною науковою мовою, з коректним використанням термінології у галузі як теоретичної фізики так і фізики напівпровідників та наноструктур. Зміст дисертації відповідає

чинним вимогам до оформлення, 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 Бандури Г. Я. складається з переліку умовних скорочень, вступу, п'яти розділів, висновків та списку із 91 джерела використаної літератури, одного додатку. Повний обсяг дисертаційної роботи становить 169 сторінок друкованого тексту. Робота належним чином ілюстрована рисунками, які наочно відображають отримані результати теоретичних розрахунків енергетичних спектрів та мінізонних структур.

У ході обговорення дисертації не було висунуто зауважень щодо самої суті роботи. Рецензенти та учасники наукового семінару відзначили високий рівень обґрунтованості наукових положень та логічну послідовність викладу матеріалу.

### **Загальний висновок**

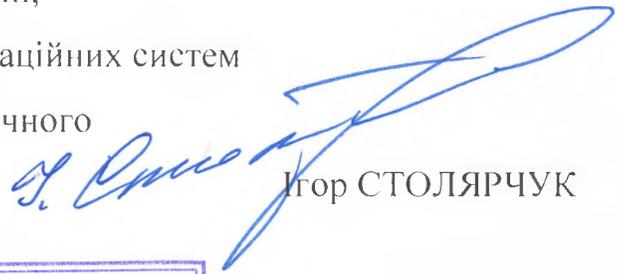
Дисертаційна робота Галини БАНДУРИ «Електронні та діркові стани невзаємодіючих квантових точок та їх впорядкованих масивів», подана на здобуття доктора філософії у галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 105 «Прикладна фізика та наноматеріали» за її актуальністю, науково-теоретичним рівнем, 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 фаховому науковому семінарі кафедри фізики та інформаційних систем факультету фізики, математики, економіки та інноваційних технологій Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка дисертацію Бандури Г.Я. 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

