

РЕЦЕНЗІЯ
офіційного рецензента
Даньків Олесі Омелянівни,
кандидата фізико-математичних наук, доцента,
доцента кафедри фізики та інформаційних систем
Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка
на дисертацію
Бандури Галини Ярославівни
«Електронні та діркові стани невзаємодіючих квантових точок
та їх впорядкованих масивів»,
подану на здобуття наукового ступеня доктора філософії
зі спеціальності 105 Прикладна фізика та наноматеріали,
галузі знань 10 Природничі науки

Загальна характеристика роботи та актуальність теми

Дисертаційна робота Бандури Галини Ярославівни присвячена теоретичному дослідженню електронних і діркових станів в ізольованих квантових точках (КТ) та впорядкованих масивах КТ сферичної та кубічної форми у межах багатозонної теорії ефективної маси з використанням теорії суцільного пружного та діелектричного середовищ. Квантові точки та надгратки на їх основі є важливими елементами сучасної нано- й оптоелектроніки, фотоніки та квантових технологій, оскільки завдяки просторовому квантовому обмеженню носіїв заряду вони демонструють унікальні спектральні, оптичні та транспортні властивості.

Робота спрямована на розв'язання актуальної наукової проблеми розвитку теорії опису квантових станів у впорядкованих наноструктурах. Основну увагу зосереджено на комплексному моделюванні впливу деформаційних і поляризаційних ефектів, а також домішкових центрів на електронні та діркові спектри. Важливе місце у дослідженні займає аналіз властивостей надграток квантових точок з елементарною коміркою, що містить різні КТ, а також вивчення впливу такої структури на формування мінізонного спектра. З огляду

на це, тема дисертаційної роботи є актуальною та відповідає пріоритетним напрямкам розвитку прикладної фізики та наноматеріалів.

Структура і зміст дисертації

Дисертаційна робота складається зі вступу, п'яти розділів, загальних висновків та списку використаних джерел. Структура роботи є логічною та послідовною, а виклад матеріалу – системним і науково обґрунтованим.

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми дисертаційного дослідження, сформульовано мету та завдання для її досягнення, визначено об'єкт та предмет дослідження, розкрито наукову новизну та практичну цінність одержаних результатів, а також підтверджено їх достовірність. Крім того, наведено дані щодо публікацій авторки дисертації, апробації основних положень на наукових конференціях та визначено особистий внесок здобувачки.

У **першому** розділі здійснено ґрунтовний аналіз сучасного стану досліджень електронних і діркових станів у квантових точках та їхніх надґратках у межах однозонної та багатозонної теорій ефективної маси. Особливу увагу приділено багатозонній теорії Латтінджера, впливу деформаційних і поляризаційних ефектів, а також проблемам теоретичного опису впорядкованих надґраток квантових точок. Чітко визначено коло нерозв'язаних задач, які обумовлюють вибір теми дисертації та її актуальність.

Другий розділ присвячено аналізу діркових спектрів у сферичних наноструктурах, виконаному у межах багатозонного наближення ефективної маси (використано моделі 6×6 та 4×4). У роботі враховано вплив деформаційних полів та поляризаційних явищ на межі розділу напівпровідникових матеріалів КТ і матриці. На прикладі гетеросистеми InAs/GaAs виявлено цікаву фізичну особливість: деформація та поляризація діють протилежно щодо енергетичного спектра дірки, що призводить до їхньої часткової взаємної компенсації. Також сформульовано критерії, за яких можливе коректне застосування спрощеної однозонної моделі замість складних багатозонних розрахунків.

У **третьому** розділі проаналізовано спільний вплив нецентральної акцепторної домішки та зовнішнього електричного поля довільного напрямку на енергетичні спектри дірок у сферичній КТ. Показано існування критичних значень електричного поля, за яких відновлюється сферична симетрія діркової густини, а також детально досліджено порушення циліндричної симетрії при перпендикулярній орієнтації поля відносно зміщення домішки. Результати мають важливе значення для керування квантовими станами у наноструктурах.

Четвертий розділ присвячений дослідженню мінізонних спектрів лінійних, двовимірних і тривимірних надграток однакових квантових точок сферичної та кубічної форм у межах однозонної теорії ефективної маси. За допомогою методу плоских хвиль визначено мінізонні структури та проведено порівняння ширин мінізон для різних геометрій надграток. Встановлено, що за однакових об'ємів квантових точок ширина мінізони для кубічних КТ є більшою, ніж у сферичних.

У **п'ятому** розділі розвинуто теорію мінізонного спектра надграток КТ із двома різними КТ у примітивній комірці. З використанням методу сильного зв'язку та наближення найближчих сусідів отримано дисперсійні залежності та проаналізовано розщеплення мінізон. Показано, що наявність різних за матеріалом або розміром КТ призводить до формування «верхніх» і «нижніх» мінізон, а отримані результати у граничних випадках узгоджуються з відомими теоретичними моделями.

Достовірність і наукова обґрунтованість результатів дисертаційної роботи забезпечуються коректною постановкою задач, використанням загально визнаних методів квантової механіки та теорії твердого тіла. Для опису електронних і діркових станів застосовано однозонну та багатозонні моделі ефективної маси (4×4 , 6×6), метод плоских хвиль і метод сильного зв'язку. Поляризаційні та деформаційні ефекти враховано в межах моделей неперервного діелектричного й пружного континуумів.

Застосування кількох незалежних теоретичних підходів дало змогу здійснити взаємну перевірку отриманих результатів та підтвердити їхню фізичну коректність. Результати в граничних випадках узгоджуються з відомими аналітичними та чисельними даними, наведеними в науковій літературі.

Наукова новизна дисертації полягає в тому, що вперше:

- кількісно проаналізовано та встановлено спільний внесок поляризаційних і деформаційних ефектів на гетеромежі квантова точка – матриця у формування енергетичних спектрів дірок у межах багатозонних моделей ефективної маси;
- визначено межі застосування багатозонних моделей 4×4 і 6×6 та умови їх переходу до однозонного наближення;
- досліджено вплив нецентральної акцепторної домішки та електричного поля довільного напрямку на симетрію і спектр діркових станів;
- отримано мінізонні спектри впорядкованих надґраток КТ різної розмірності та геометрії, показано відмінності й подібності в ширинах зон надґраток, утворених КТ кубічної та сферичної форм;
- розвинено теорію мінізонної структури надґраток із двома різними КТ у примітивній комірці та встановлено закономірності розщеплення електронних мінізон.

Практичне значення результатів

Отримані результати та розроблені теоретичні моделі можуть бути використані для прогнозування електронних і оптичних властивостей КТ та надґраток на їх основі. Вони є корисними для проєктування наноструктур у фотоніці, оптоелектроніці, квантових сенсорах і елементах пам'яті, а також для оптимізації параметрів матеріалів із заданими спектральними характеристиками.

Не знижуючи загальної високої оцінки дисертаційної роботи, доцільно висловити кілька **зауважень**:

1. У розділі 4 досліджуються ідеалізовані періодичні надгратки квантових точок із повністю впорядкованими параметрами. Вплив слабого безладу (розкиду радіусів КТ, флуктуацій міжточкових відстаней або глибини потенціальних ям) на мінізонний спектр не аналізується. Водночас навіть слабкий безлад у реальних масивах КТ може призводити до істотного розмиття мінізонної структури або часткової локалізації станів квазічастинок. Разом із тим обраний авторкою підхід є виправданим для встановлення фундаментальних закономірностей формування енергетичних спектрів квазічастинок і механізмів їх розщеплення.
2. Формула (2.26) записана некоректно. По-перше, нижній індекс j є зайвим, оскільки в цьому розділі розглядаються виключно діркові стани валентної зони й жодного поділу за типом зони не вводиться. По-друге, у формулі зсув енергетичних рівнів записано через абсолютні значення як деформації, так і деформаційного потенціалу. Такий запис фактично усуває інформацію про знак відповідних величин і призводить до того, що знак деформації та знак деформаційного потенціалу не впливають на результат. Фізично ж зсув валентної зони визначається добутком деформації та деформаційного потенціалу і може мати як додатний, так і від'ємний знак залежно від характеру деформації та матеріалу. Запис у вигляді (2.26) може бути коректним лише за умови наперед відомого характеру деформації як у квантовій точці, так і в матриці.
3. У розділі 2 детально враховано вплив поляризаційних зарядів на гетеромежі та деформаційного потенціалу, зумовленого неузгодженням сталих ґраток КТ і матриці, на енергетичний спектр. Водночас у розділі 3 при розгляді дірки в КТ GaAs/AlAs ці ефекти не враховуються, хоча наявність акцепторної домішки з ненульовим ефективним об'ємом та зовнішнього електричного поля може суттєво змінювати ефективність поляризаційної взаємодії та величину деформації.

Зазначені зауваження не впливають на висновок про високий науковий рівень дисертаційного дослідження та його загальну позитивну оцінку.

Загальна кількість публікацій за темою роботи становить 13. Зокрема, авторка опублікувала 5 статей, з яких 4 – у виданнях, що індексуються в базах даних Scopus/Web of Science (2 – у журналах кuartилів Q1–Q2 та 2 – кuartилів Q3–Q4). Ще одну статтю опубліковано в журналі, включеному до переліку фахових видань України категорії Б. Матеріали дослідження також пройшли широку апробацію на восьми всеукраїнських і міжнародних конференціях.

Відсутність порушень академічної доброчесності

Дисертаційну роботу виконано з дотриманням усіх стандартів академічної доброчесності. Зокрема, матеріали не містять неправомірних запозичень чи спотворення фактів, а цитування першоджерел здійснено відповідно до чинних вимог. Обсяг і характер особистих результатів у колективних публікаціях чітко розмежовано та задекларовано. Дисертаційна робота є самостійним науковим дослідженням.

Загальний висновок

Дисертаційна робота Бандури Галини Ярославівни «Електронні та діркові стани невзаємодіючих квантових точок та їх впорядкованих масивів», подана на здобуття наукового ступеня доктора філософії в галузі знань 10 Природничі науки за спеціальністю 105 Прикладна фізика та наноматеріали, є завершеним, самостійним і науково вагомим дослідженням, виконаним на високому теоретичному рівні. За змістом, науковою новизною, практичним значенням, рівнем обґрунтованості отриманих результатів та оформленням дисертаційна робота відповідає всім чинним вимогам наказу МОН України «Про затвердження Вимог до оформлення дисертації» № 40 від 12 січня 2017 року (зі змінами), а також вимогам постанови Кабінету Міністрів України № 44 від 12 січня 2022 року «Про порядок присудження ступеня доктора філософії та

скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії».

Вважаю, що авторка дисертаційної роботи, Бандура Галина Ярославівна, заслуговує на присудження наукового ступеня доктора філософії в галузі знань 10 Природничі науки за спеціальністю 105 Прикладна фізика та наноматеріали.

Офіційний рецензент:

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

Олеся

Олеся ДАНЬКІВ

