

РЕЦЕНЗІЯ
офіційного рецензента
Гольського Віталія Богдановича ,
кандидата фізико-математичних наук, доцента,
завідувача 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

У сучасній фізиці напівпровідників і нанофізиці особливе місце займають квантові точки (КТ) та впорядковані масиви квантових точок, які є базовими елементами нано- та оптоелектронних пристроїв нового покоління. Завдяки просторовому квантовому обмеженню носіїв заряду такі системи проявляють унікальні електронні та оптичні властивості, що відкриває широкі можливості для їх застосування у фотоніці, сонячній енергетиці, сенсорних технологіях та квантових інформаційних системах.

Актуальність дисертаційної роботи зумовлена необхідністю побудови послідовної та фізично обґрунтованої теорії електронних і діркових станів як в ізольованих КТ, так і у впорядкованих масивах квантових точок з різною геометрією, складом і типом впорядкування. Особливо важливим є врахування реалістичних факторів, зокрема поляризації та деформації на гетеромежі КТ–матриця, впливу домішок та зовнішніх електричних полів, які істотно змінюють енергетичні спектри носіїв заряду.

Окрему наукову й прикладну цінність має дослідження мінізонної структури впорядкованих надґраток квантових точок (НКТ), у тому числі систем

із двома різними КТ в елементарній комірни НКТ. Такі структури є перспективними для створення сонячних елементів з проміжною зоною та керованих наноелектронних пристроїв. У зв'язку з цим тема дисертаційної роботи є актуальною, сучасною 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. Усі розділи логічно пов'язані між собою, послідовно розкривають поставлені завдання та забезпечують цілісність дослідження.

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми, сформульовано мету та завдання дисертаційного дослідження, визначено об'єкт і предмет дослідження, наведено відомості про наукову новизну та практичне значення результатів, подано інформацію про публікації й апробацію результатів дисертації, а також окреслено особистий внесок здобувачки.

У **першому** розділі здійснено ґрунтовний аналіз сучасного стану досліджень електронних і діркових станів у КТ та НКТ у рамках однозонної та багатозонної теорій ефективної маси. Особливу увагу приділено багатозонній теорії Латтінджера, впливу деформації та поляризації, а також проблемам теоретичного опису впорядкованих надґраток квантових точок. Чітко визначено коло невирішених задач, що обґрунтовує вибір теми дисертації.

У **другому** розділі в рамках багатозонної теорії ефективної маси (моделі «6×6» та «4×4») досліджено діркові стани у сферичних ізольованих КТ з урахуванням деформації та поляризації на гетеромежі. Встановлено межі застосування різних багатозонних моделей та показано умови переходу до однозонного наближення. Отримані результати узгоджуються з відомими теоретичними даними у граничних випадках.

У **третьому** розділі досліджено спільний вплив акцепторної домішки та зовнішнього електричного поля на діркові енергетичні спектри у сферичних КТ. Показано існування критичних значень і напрямків електричного поля, за яких відновлюється виродження енергетичних рівнів, а також детально проаналізовано симетрію діркових станів залежно від геометрії задачі.

У **четвертому** розділі на основі однозонної теорії ефективної маси досліджено електронні та діркові мінізонні спектри у лінійних, двовимірних і тривимірних впорядкованих НКТ сферичної та кубічної форм. За допомогою методу плоских хвиль визначено мінізонні структури та проведено порівняння ширин мінізон для різних геометрій надґраток.

У **п'ятому** розділі розвинено теорію мінізонного спектру НКТ з двома різними КТ у примітивній комірці. Показано розщеплення мінізон і встановлено закономірності зміни їх ширин залежно від матеріалу та розмірів КТ. Отримані результати узгоджуються з відомими теоретичними моделями у відповідних граничних випадках.

Достовірність і наукова обґрунтованість результатів дисертаційної роботи Бандури Г. Я. забезпечується використанням загальноновизнаних і апробованих методів квантової механіки та теорії твердого тіла. Для опису електронних і діркових станів у КТ застосовано однозонну та багатозонні моделі ефективної маси (моделі «4×4» і «6×6»), які є стандартними для аналізу валентної зони напівпровідників і коректно враховують спін-орбітальну взаємодію. Поляризаційні та деформаційні ефекти на гетеромежі КТ–матриця враховано в межах моделей неперервного діелектричного та пружного континуумів. Енергетичні спектри обчислено шляхом розв'язання стаціонарного рівняння Шредінгера з коректно заданими граничними умовами, що відповідають фізичній постановці задачі.

Мінізонну структуру впорядкованих НКТ визначено з використанням методу плоских хвиль та методу сильного зв'язку, які є перевіреними

інструментами аналізу періодичних наноструктур. Отримані результати у граничних випадках узгоджуються з відомими аналітичними розв'язками та результатами інших теоретичних досліджень.

Застосування кількох незалежних теоретичних підходів для аналізу одних і тих самих систем дозволило взаємно перевірити результати та мінімізувати вплив модельних обмежень. Сукупність наведених факторів свідчить про високу достовірність і наукову надійність результатів дисертаційної роботи.

Наукова новизна дисертації полягає у тому, що перше

- встановлено кількісні внески поляризації та деформації на гетеромежі КТ–матриця в енергетичний спектр дірки у багатозонних моделях ефективної маси;
- визначено умови компенсації впливів деформації та поляризації для КТ різних гетеросистем;
- досліджено вплив нецентральної акцепторної домішки та довільно орієнтованого електричного поля на діркові енергетичні спектри;
- отримано мінізонні спектри для впорядкованих НКТ різної розмірності та геометрії;
- запропоновано теорію мінізонної структури НКТ з двома КТ у базисі та встановлено закономірності розщеплення мінізон.

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

1. У теорії впорядкованих масивів КТ використано наближення найближчих сусідів, яке є стандартним і фізично обґрунтованим для слабого тунелювання. Водночас для щільних надґраток вклад далеких сусідів може впливати на форму мінізон. Доцільним було б стисло прокоментувати очікувані зміни мінізонної структури при виході за межі цього наближення.

2. Поляризаційні та деформаційні ефекти проаналізовано в рамках континуальних моделей, що є поширеним підходом у фізиці гетероструктур. Однак для надмалих КТ атомістичні ефекти можуть призводити до кількісних відхилень. Було б доречно зазначити, для яких мінімальних розмірів КТ застосований континуальний опис залишається коректним.

3. У дисертаційній роботі переважно використано міжнародно усталену термінологію та позначення, однак у деяких місцях спостерігається варіативність у виборі символів для фізичних величин. Було б доцільно уніфікувати позначення по всьому тексту, а не тільки у рамках розділів, для підвищення зручності сприйняття матеріалу читачем.

Наведені зауваження мають рекомендаційний та дискусійний характер і не знижують загальної високої оцінки дисертаційної роботи, яка є завершеним, самостійним і науково вагомим дослідженням.

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

Загальний висновок.

Дисертаційна робота Бандури Г. Я. «Електронні та діркові стани невзаємодіючих квантових точок та їх впорядкованих масивів», що подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії у галузі знань 10 Природничі науки за спеціальністю 105 Прикладна фізика та наноматеріали, за своїм оформленням, актуальністю обраної теми, науковим рівнем, змістом, рівнем наукової новизни та практичним значенням отриманих результатів є завершеною науковою працею, яка відповідає всім чинним вимогам щодо змісту та оформлення дисертаційних робіт (наказ МОН України «Про затвердження Вимог до оформлення дисертації» № 40 від 12 січня 2017 р., зі змінами, та вимогам, затвердженим постановою Кабінету Міністрів України «Про порядок

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, Бандура Галина Ярославівна, заслуговує на присудження наукового ступеня доктора філософії у галузі знань 10 Природничі науки за спеціальністю 105 Прикладна фізика та наноматеріали.

Офіційний рецензент:

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

Віталій ГОЛЬСЬКИЙ