

**ВІДГУК**  
**офіційного опонента**  
**Балабай Руслани Михайлівни,**  
**доктора фізико-математичних наук, професора,**  
**професора кафедри фізики та методики її навчання**  
**Криворізького державного педагогічного університету**  
**на дисертацію Бандури Галини Ярославівни на тему:**  
**«Електронні та діркові стани невзаємодіючих квантових точок та**  
**їх впорядкованих масивів»,**  
**подану на здобуття наукового ступеня доктора філософії**  
**в галузі знань 10 «Природничі науки»**  
**за спеціальністю 105 «Прикладна фізика та наноматеріали»**

**Актуальність дисертації**

Напівпровідникові квантові точки (КТ) привертають значну увагу завдяки численним застосуванням в оптичних пристроях. Молекулярно-променева епітаксія, метало-органічне хімічне осадження з парової фази, синтез хімічними методами дозволяють технологам вирощувати напівпровідникові КТ різних геометрій, серед яких системи сферичних квантових точок класу ядро-оболонка є високо ймовірними. Зазвичай, квантові точки класу ядро-оболонка складаються з напівпровідникових матеріалів типу АІІВVI, АІІВV та АІVВVI, а їх фізичні властивості залежать від ширини забороненої зони та зсуву енергетичних зон, а також від невідповідності кристалічної решітки матеріалів гетероструктури КТ ядро-оболонка, звідки вплив деформації також має важливе значення для оптоелектронних властивостей КТ.

На цей час виконані ряд теоретичних досліджень квантових точок класу ядро-оболонка, в яких порівнювалися їх електронні та діркові стани, спектри випромінювання, оптичні властивості в залежності від розміру квантових точок та форми потенціалу обмеження, від включення домішок, наявності електричних і магнітних полів та ефектів гідростатичного тиску, але ці

дослідження не є закінченими і всебічними.

Дисертаційна робота Бандури Галини Ярославівни присвячена вирішенню важливої наукової проблеми – комплексному теоретичному дослідженню електронних та діркових станів у КТ та їхніх впорядкованих масивах за наявності домішок у КТ та прикладених електричних полів. Особливу актуальність має розгляд діркових станів у рамках багатозонної теорії ефективної маси з одночасним урахуванням ефектів деформації та поляризації на гетеромежі КТ-матриця, що досі залишалось недостатньо дослідженим. Не менш важливим є розвиток теорії надґраток КТ з неоднорідним базисом, коли в елементарній комірці присутні КТ різного розміру або складу.

Практична значущість обраної теми підтверджується тим, що керування енергетичними спектрами носіїв заряду за допомогою зовнішніх електричних полів, домішок та структурних параметрів відкриває нові можливості для цілеспрямованого керування характеристиками оптоелектронних пристроїв. Розуміння мінізонної структури впорядкованих масивів КТ є важливим для підвищення ефективності сонячних елементів нового покоління.

Актуальність дисертаційного дослідження Бандури Г.Я. підтверджується також його інтеграцією у планові науково-дослідні теми кафедри фізики та інформаційних систем Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка:

1. "Отримання та дослідження фізичних властивостей нанокомпозитних матеріалів на основі широкозонних напівпровідників" (2022–2025).
2. "Фотополімерні матриці та наноносії при конструюванні біосенсорів для моніторингу стану довкілля та якості питної води" (0121U109539, 2021–2023).
3. "Вплив зовнішніх полів на синтез, сенсорні властивості квантових точок для медичних застосувань в умовах війни" (0124U001093, 2024–2025).

4. "Біонаноконплекси напівпровідникова квантова точка – протейн для біомедичних застосувань: синтез, дослідження, характеристика з використанням машинного навчання" (0125U002002, 2025–2027).

Отже, дисертаційна робота Бандури Галини Ярославівни, що присвячена теоретичному дослідженню електронних та діркових станів у КТ та їхніх впорядкованих масивах, має високе як фундаментальне, так і прикладне значення.

### **Обґрунтованість основних наукових положень та висновків, сформульованих у дисертації**

Дисертаційна робота Бандури Г.Я. є завершеним науковим дослідженням, яке містить наукові положення, висновки та рекомендації, що характеризуються високим ступенем обґрунтованості та достовірності.

Достовірність отриманих результатів забезпечується використанням комплексу сучасних та добре апробованих теоретичних методів фізики напівпровідників та наносистем. Зокрема, в роботі застосовано багатозонну теорію ефективної маси в рамках теорії Латтінджера-Кона у сферичному наближенні Балдареші-Ліпарі, однозонну модель ефективної маси, метод плоских хвиль та метод сильного зв'язку в наближенні найближчих сусідів. Ефекти деформації та поляризації на гетеромежах враховано в рамках моделей неперервного пружного та діелектричного континуумів відповідно.

Верифікацію наукових положень здійснено шляхом взаємної перевірки аналітичних і чисельних розрахунків. Критерієм істинності слугує кореляція отриманих результатів з наявними теоретичними даними та їх асимптотичний перехід до відомих результатів для спрощених систем.

Строга методологічна база дослідження, ретельний аналіз отриманих даних та їх порівняння з відомими теоретичними результатами забезпечують логічність, послідовність та завершеність роботи в цілому.

## Оцінка змісту дисертації, її завершеності в цілому

Дисертаційна робота Бандури Г.Я. є кваліфікаційною науковою працею, присвяченою комплексному теоретичному дослідженню електронних та діркових станів у КТ та їхніх впорядкованих масивах. Робота має логічну та послідовну структуру, викладена грамотною науковою мовою. Вона складається зі вступу, п'яти розділів, висновків, списку використаних джерел.

У вступі обґрунтовано актуальність теми, чітко сформульовано мету роботи – дослідження впливу електричного поля на енергетичні спектри КТ з акцепторною домішкою у рамках багатозонних моделей ефективної маси та розроблення аналітичної теорії мінізонної структури надґраток квантових точок з однією і двома квантовими точками у базисі. Також визначено завдання, наукову новизну та практичне значення одержаних результатів.

У першому розділі виконано системний аналіз наукової літератури, що стосується багатозонної теорії ефективної маси (зокрема, теорії Латтінджера), методів теоретичного аналізу квантових точок, а також експериментальних методів отримання впорядкованих масивів квантових точок. Цей огляд дозволив дисертантці чітко ідентифікувати ключові наукові прогалини, що й визначило основні напрями дослідження.

У другому розділі дисертантка закладає теоретичний фундамент роботи, розвиваючи теорію діркових станів у сферичній КТ в рамках багатозонних моделей ефективної маси  $4 \times 4$  та  $6 \times 6$  з одночасним урахуванням ефектів деформації та поляризації на гетеромежі КТ. Особливо варто відзначити систематичне порівняння результатів різних моделей ( $6 \times 6$ ,  $4 \times 4$ , однозонної) та встановлення меж їхньої застосовності для різних гетеросистем і розмірів КТ. Продемонстровано, що для гетеросистеми InAs/GaAs впливи деформації та поляризації є протилежними та частково компенсуються.

Третій розділ присвячено дослідженню спільного впливу акцепторної домішки та зовнішнього електричного поля довільної орієнтації на діркові

енергетичні спектри КТ. Дисертантка виявляє та теоретично обґрунтовує тонкі ефекти відновлення симетрії: показано існування критичного електричного поля, при якому частково відновлюється сферична симетрія розподілу діркової густини. Встановлено, що орієнтація електричного поля відносно напрямку зміщення домішки суттєво впливає на характер розщеплення енергетичних рівнів дірки. Також досліджено вплив цих параметрів на спектральний коефіцієнт поглинання електромагнітних хвиль.

У четвертому розділі дисертантка переходить до аналізу впорядкованих масивів КТ. Використовуючи метод плоских хвиль, отримано мінізонну структуру для електронів і дірок у одно-, дво- та тривимірних надгратках однакових КТ сферичної та кубічної форм. Проведено детальне порівняння енергетичних спектрів та ширин мінізон для різних геометрій масивів, показано, що ширина мінізони зростає зі збільшенням розмірності надгратки.

У п'ятому розділі описана теорія надграток з двома різними КТ в примітивній комірці надгратки. Показано, що наявність неоднорідності (різниця в матеріалах або розмірах) призводить до розщеплення основної мінізони на верхню та нижню, що має важливі наслідки для оптичних властивостей таких структур. Цей результат має пряме прикладне значення для розробки наноструктур для фотоелектричних та термоелектричних застосувань.

Дисертація завершується чітко сформульованими висновками, які повністю відповідають поставленим у роботі завданням, логічно впливають зі змісту розділів та свідчать про досягнення поставленої мети.

### **Наукова новизна та її обґрунтованість**

Основні наукові положення дисертаційної роботи, які виносяться на захист, містять наукову новизну, є повністю доведеними, теоретично обґрунтованими та підтвердженими розрахунками. До найбільш значущих результатів належать такі, що отримані вперше:

1. Встановлено внески поляризації та деформації на гетеромежі КТ-

матриця гетеросистеми InAs/GaAs в енергетичний спектр дірки та показано, що у рамках моделі з проміжною спін-орбітальною взаємодією (модель  $6 \times 6$ ) вплив деформації та поляризації повністю компенсується для радіусів КТ більших  $40 \text{ \AA}$ , а для менших радіусів – частково.

2. Показано, що вибір моделі валентної зони ( $4 \times 4$ ,  $6 \times 6$  чи однозонна) суттєво впливає на значення енергії дірки в малих КТ гетеросистеми InAs/GaAs (радіус менший  $40 \text{ \AA}$ ). Встановлено межі застосовності різних багатозонних моделей для опису діркових станів у напівпровідникових КТ.

3. Досліджено вплив зовнішнього електричного поля довільної орієнтації на енергетичний спектр дірок у сферичній КТ з акцепторною домішкою, зміщеною від центра. Доведено існування критичного електричного поля, при якому частково відновлюється сферична симетрія розподілу діркової густини.

4. Отримано залежності спектрального коефіцієнта поглинання від величини прикладеного електричного поля та розташування акцепторної домішки. Встановлено закономірності формування спектральних смуг поглинання та вплив дисперсії розмірів КТ на їхню структуру.

5. Розраховано енергетичні мінізони для надґраток КТ кубічної та сферичної форм з одною КТ у базисі та встановлено, що ширини мінізон для надґраток кубічних КТ є більшими, ніж для сферичних при однакових об'ємах. Встановлено, що ширина мінізони зростає зі збільшенням розмірності надґратки (одномірна < двомірна < тривимірна).

6. Запропоновано теорію енергетичного мінізонного спектру надґраток з двома КТ різного розміру або матеріалів у базисі. Показано, що наявність неоднорідності призводить до розщеплення основної мінізони на верхню та нижню зони, причому верхня мінізона має завжди більшу ширину, ніж нижня.

Ці нові наукові результати є вагомим внеском у фізику наноструктур та

відкривають нові можливості для теоретичного опису та практичного застосування КТ та їхніх впорядкованих масивів.

### **Теоретична та практична цінність**

Результати, отримані в дисертаційній роботі Бандури Г.Я., мають цінність як для фундаментальної фізики наносистем, так і для прикладних розробок у сфері нанотехнологій та оптоелектроніки.

**Теоретична цінність** роботи полягає в тому, що розвинуті аналітичні моделі та отримані закономірності становлять вагомий внесок у фундаментальну фізику наносистем. Вперше систематично досліджено діркові стани в КТ у рамках багатозонної моделі ефективної маси з одночасним урахуванням деформації та поляризації, встановлено межі застосовності різних моделей. Розвинута теорія мінізонної структури надґраток з неоднорідним базисом розширює розуміння електронних процесів у періодичних наноструктурах і може слугувати основою для подальшого моделювання більш складних систем КТ.

**Практичне значення** отриманих результатів є багатоаспектним:

1. Розроблені теоретичні моделі дозволяють цілеспрямовано проєктувати та оптимізувати наноструктури на основі напівпровідникових КТ з урахуванням впливу електричного поля, локалізованих домішок, деформації та поляризації.
2. Аналітична модель впливу нецентрально розміщеної акцепторної домішки та різних орієнтацій електричного поля дозволяє оптимізувати процес легування та керувати фотолюмінесцентними властивостями КТ у світлодіодних структурах із мінімальними втратами на безвипромінювальні процеси.
3. Розвинута теорія мінізонної структури впорядкованих надґраток, що містять одну або дві КТ в базисі, дає змогу передбачати ефективність роботи сонячних елементів. Це має пряме практичне значення для

досягнення високих коефіцієнтів корисної дії (>60%) у фотоелектричних перетворювачах нового покоління.

4. Отримані закономірності залежності ширини мінізон від геометрії надґратки можуть бути використані для конструювання гетероструктур КТ із заданими швидкісними та спектральними характеристиками електронного переносу, що важливо для квантових комп'ютерів, елементів пам'яті та високошвидкісних електронних перемикачів.

5. Теорія надґраток з двома типами КТ у комірці відкриває можливість моделювання складних періодичних структур для термоелектричних матеріалів та багатошарових наноструктур.

Отже, дисертаційна робота Бандури Галини Ярославівни має високу наукову цінність, а її результати можуть знайти широке застосування у сучасній промисловості наноматеріалів та оптоелектроніки.

#### **Зауваження та дискусійні питання**

Високо оцінюючи дисертаційну роботу Бандури Г.Я. в цілому, вважаю за доцільне висловити декілька зауважень та питань, які мають переважно дискусійний та рекомендаційний характер і не знижують загального позитивного враження від проведеного дослідження.

1. У дисертації використовується модель прямокутних потенціальних ям та бар'єрів. У реальних гетероструктурах профіль потенціалу на межах може бути більш плавним через міжфазну дифузію та сегрегацію атомів. Хоча для якісного аналізу модель прямокутних ям є цілком виправданою, цікавим напрямком подальших досліджень могло б бути врахування більш реалістичних профілів потенціалу.

2. У розділі 5 розглядаються надґратки з двома різними КТ в базисі. Хотілося б зрозуміти, як вбачає дисертантка проведення дослідження впливу порядку розташування квантових точок у надґратці (наприклад, АВАВАВ... проти ААВВААВВ...) на мінізонну структуру. Цей аспект міг би мати

практичне значення для дизайну багат шарових структур.

3. У роботі містяться окремі неточності у формулюваннях. Наприклад, у вступі зазначено: "Вони зображають собою малі напівпровідникові структури..." – коректніше було б "представляють собою" або "є". Також у деяких місцях зустрічаються стилістичні недоліки, які не впливають на зміст, але потребують редакційного опрацювання.

Слід наголосити, що висловлені зауваження не є принциповими, не торкаються суті отриманих наукових результатів і жодним чином не знижують високої наукової та практичної цінності дисертаційної роботи.

### **Апробація результатів дослідження та їх повнота викладення в опублікованих працях**

Основні результати дисертаційної роботи пройшли широку та всебічну апробацію. За матеріалами дисертації опубліковано 13 наукових праць, з яких:

- 5 статей у наукових фахових виданнях, з них:
  - 4 статті у виданнях, що індексуються в міжнародних наукометричних базах даних Scopus та/або Web of Science (2 статті у журналах з квантилями Q1-Q2, 2 статті у журналах з квантилями Q3-Q4);
  - 1 стаття у виданні категорії Б наукових фахових видань України;
- 8 тез доповідей у матеріалах міжнародних та всеукраїнських наукових конференцій.

Результати дисертації також були представлені на авторитетних міжнародних та всеукраїнських конференціях, зокрема: XVII, XIX та XX International Freik Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems (2021, 2023, 2025); IX Ukrainian Scientific Conference on Physics of Semiconductors (2023); XI-th International Conference "Topical Problems of Semiconductor Physics" (2024); "Lashkaryov's readings. Young Scientists Conference on Semiconductor Physics" (2025).

Така широка презентація результатів та їхнє обговорення з провідними фахівцями в галузі фізики напівпровідників та наноструктур свідчать про визнання наукової спільноти.

Особливо варто відзначити публікацію результатів у високорейтингових міжнародних журналах, зокрема в Physics Letters A та Physica B: Condensed Matter, що є виданнями з високим імпаکت-фактором у галузі фізики конденсованого стану.

Отже, кількість та рівень опублікованих праць є цілком достатніми, повною мірою відображають основний зміст дисертаційного дослідження та свідчать про його належну апробацію в науковій спільноті.

### **Дані про відсутність порушень академічної доброчесності**

Аналіз електронної версії дисертації не виявив ознак академічного плагіату, фабрикації, фальсифікації чи інших порушень академічної доброчесності. Текст представлених матеріалів дисертації є оригінальним, всі цитати позначені коректно та правильно відображені в списку літератури. Власні результати дисертантки чітко відокремлені від результатів інших авторів. У роботі наведено детальний опис особистого внеску здобувачки до кожної публікації, що свідчить про дотримання принципів авторської чесності.

Використані в роботі теоретичні методи та моделі є загальновизнаними в науковій спільноті, їхнє застосування належним чином обґрунтоване та супроводжується посиланнями на відповідні джерела. Отримані результати є логічним продовженням та розвитком існуючих підходів, що підтверджується їхньою узгодженістю з відомими результатами в граничних випадках.

Отже, дисертаційну роботу Бандури Галини Ярославівни слід визнати самостійною та оригінальною науковою працею.

### **Загальний висновок**

Дисертаційна робота Бандури Галини Ярославівни. на тему «Електронні та діркові стани невзаємодіючих квантових точок та їх впорядкованих масивів» є

завершеною науковою працею, в якій вирішено важливу наукову задачу – розроблено послідовну теорію електронних та діркових станів у КТ з урахуванням багатозонності, деформації, поляризації, домішок та зовнішніх полів, а також побудовано теорію мінізонної структури впорядкованих надграток КТ з однорідним та неоднорідним базисом.

Результати дисертації мають важливе теоретичне та практичне значення для прикладної фізики та наноматеріалів. За своєю актуальністю, методологічним рівнем виконання, науковою новизною, обґрунтованістю положень та висновків дисертація відповідає «Вимогам до оформлення дисертації», затверджених наказом МОН України № 40 від 12.01.2017 р. та постанови Кабінету Міністрів України «Про затвердження Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії», № 44 від 12.01.2022 р.

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

**Офіційний опонент:**

доктор фізико-математичних наук, професор,  
професор кафедри фізики та  
методики її навчання  
Криворізького державного  
педагогічного університету

Руслана Балабай

