

## ВІДГУК

офіційного опонента — кандидата фізико-математичних наук, доцента,

доцента кафедри програмної інженерії

Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя

Бойка Ігоря Володимировича

на дисертаційну роботу Верешко Євгенії Юріївни

на тему: **“Теорія електронних станів та електрон-фононної взаємодії у структурних елементах квантових каскадних детекторів”**,

яка подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії в галузі знань

10 Природничі науки за спеціальністю 104 Фізика та астрономія

Дисертаційна робота Верешко Євгенії Юріївни присвячена розробці теорії електрон-фононної взаємодії у плоских напівпровідникових наносистемах та виконанню розрахунків на основі цієї теорії для наноструктур, що є складовими робочими елементами квантових каскадних детекторів. Проведений аналіз дисертаційної роботи Верешко Є.Ю. “Теорія електронних станів та електрон-фононної взаємодії у структурних елементах квантових каскадних детекторів ” показує її приналежність до наукової школи та тематики кафедри теоретичної фізики потім кафедри теоретичної фізики та комп’ютерного моделювання Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича. Крім того результати проведеного аналізу дозволяють сформулювати висновки щодо актуальності результатів поданих у дисертації, ступеня обґрунтованості основних наукових положень, достовірності та меж їх застосовності, наукової новизни, практичного значення, а також стосовно загальної оцінки дисертаційної роботи, які подано далі.

### **Актуальність дисертаційної роботи**

Для забезпечення оптимального функціонування наноприладів різних частотних діапазонів електромагнітних хвиль, що створені на основі плоских напівпровідникових наносистем однією із основних вимог є забезпечення когерентності режиму тунелювання електронного потоку та однозначне встановлення геометричних конфігурацій, в яких реалізуються робочі частоти за рахунок квантових переходів у активній зоні.

Вирішення цієї наукової проблеми напряму пов’язане з розв’язанням ряд дуже пов’язаних між собою теоретичних задач, які й до того ж, мають велику практичну цінність, особливо якщо йдеться про багат шарові кільккаскадні надгратки. Розв’язання електронної задачі з використанням лише моделі закритих наносистем є часто недостатнім, оскільки розрахунок лише сил стаціонарного спектру та сил осцилятора може давати такі оптимальні геометричні конфігурації, які на практиці не реалізуються з ряду причин. Згадані причини можуть бути встановленими лише в раках теорії, згідно якої наносистема є відкритою, а електрони є квазістаціонарними з скінченними асами життя, що пов’язані з характеристиками цих станів – резонансними ширинами. Саме в межах таких теоретичних моделей можна встановити, що

не зважаючи на формальну прийнятність геометричної конфігурації, час життя електронного квазістаціонарного стану у ній настільки великий, що він гарантовано буде зруйнований за рахунок дисипативних факторів.

Розв'язання згаданих задач є можливим лише при ґрунтованому дослідженні впливу фононів, а саме електрон-фононної взаємодії на електронний спектр. Крім того оскільки наноструктури, що є структурними елементами квантових каскадних детекторів є розрахованими на функціонування при різних температурах, вже існуючий стандартний підхід діаграмної техніки Фейнмана в методі функцій Гріна при застосуванні до електрон-фононної взаємодії має бути модифікованим. Слід також мати на увазі, що застосування такої теорії електрон-фононної взаємодії має мати місце для таких наноструктур, спектральні характеристик яких вже попередньо досліджувались та порівнювались на основі як моделей закритих так і відкритих наносистем. Розв'язанню таких актуальних теоретичних задач безпосередньо і присвячена дисертація Верешко Є.Ю.

Дисертаційна робота виконувалась відповідно планів наукової тематики кафедри теоретичної фізики та комп'ютерного моделювання Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича «Дослідження спектрів квазічастинок, перенормованих взаємодіями з електромагнітними та квантованими полями в низько розмірних і 3d системах із метою оптимізації параметрів наноприладів» (номер Держреєстрації 0116U004083, 2016-2020pp.) та «Квантова теорія фізичних явищ і процесів у низьковимірних системах різної симетрії як основних елементах сучасних наноприладів» (номер Держреєстрації 0121U109823, 2021-2025pp.).

**Обґрунтованість та достовірність одержаних результатів** поданих у дисертаційній роботі забезпечується використанням ефективних методів теоретичної фізики та порівнянням отриманих теоретичних результатів з експериментальними даними. У безпосередніх дослідженнях дисертантка використовувала ефективні сучасні методи теоретичної фізики та добре зарекомендований математичний апарат такий як: рівняння Шредінґера та дисперсійні рівняння для отримання спектру електронів, метод S- матриці, методи функції густини ймовірності та коефіцієнта прозорості, метод діаграмної техніки Фейнмана для функцій Гріна, рівняння Дайсона. Апробацію результатів досліджень здійснено на всеукраїнських і міжнародних конференціях, всі результати подані у дисертації було опубліковано в рецензованих високореєтингових фахових виданнях, які індексовані наукометричними базами Scopus та Web of Science.

### **Новизна отриманих в дисертаційній роботі результатів**

Наукові результати, що представлені в дисертаційній роботі є новими, актуальними та оригінальними. Головні наукові результати, що розкривають суть та зміст дисертаційної роботи є такими:

- I. Уперше встановлено, що у каскаді широкосмугового квантового каскадного детектора далекого інфрачервоного діапазону з двоямною активною зоною та шестиямним екстрактором за довільних значень температури основний внесок у перенормування електронних станів зумовлений взаємодією з гілками високоенергетичної смуги інтерфейсних фононів, а причому внесок обмежених фононів у взаємодію виявляється на порядок меншим..
- II. Встановлено, що у тому випадку, якщо різниця між енергіями двох довільних станів електрона у багат шаровому каскаді збігається з енергією поздовжнього фонона довільного шару, відбувається різке зростання величин і зміщень, і згасань обох станів, спричинених взаємодією з оптичними фононами.
- III. Уперше з використанням розвиненої теорії електронних станів у закритій наноструктурі з довільною кількістю каскадів показано, що у багатокаскадній наносистемі енергетичний спектр електрона характеризується квазідискретними смугами, кількість рівнів у яких дорівнює кількості каскадів. Встановлено, що оцінка спектральних характеристик енергетичних зон у закритій багатокаскадній структурі може бути із задовільною точністю здійснена у простій моделі Кроніга-Пенні з двокаскадним періодичним елементом надгратки.
- IV. Вперше показано, що ймовірності знаходження електрона у станах з енергіями з однієї зони можуть суттєво відрізнятись у різних каскадах закритої багатокаскадної наносистеми, через що смуга поглинання N-каскадного детектора формується N-квантовими переходами лише між тими станами, які характеризуються близькими просторовими розподілами ймовірностей знаходження, а ширина смуги поглинання визначається лише ширинами відповідних електронних зон, між якими відбуваються робочі переходи.
- V. Вперше розвинено теорію спектральних характеристик квазістаціонарних станів електрона у відкритій резонансно-тунельній наноструктурі з довільною кількістю однакових каскадів з використанням аналітично розрахованих S-матриці розсіювання, функції густини ймовірності та коефіцієнта прозорості у трьох різних підходах. Встановлено, що у відкритій N-каскадній наносистемі виникають комплекси N-квазістаціонарних станів, резонансні енергії та резонансні ширини яких однозначно визначаються лише комплексними полюсами S-матриці.
- VI. Вперше виконано дослідження еволюції резонансних енергій та резонансних ширин квазістаціонарних станів електрона у відкритих багатокаскадних резонансно-тунельних структурах у залежності від товщин внутрішньокаскадних і міжкаскадних потенціальних бар'єрів, в результаті чого було виявлено такі конфігурації, за яких структуру можна вважати закритою



## **Практичне значення отриманих результатів дисертаційної роботи**

Отримані здобувачкою теоретичні результати, що викладені в дисертаційній роботі спрямовані на відшукування геометричних конфігурацій двоямної активної зони квантового каскадного детектора далекого інфрачервоного діапазону, у яких ефект, що полягає у зростанні зміщень і затухань електронних станів, зумовлених взаємодією з оптичними фонами, найбільше проявляється і може впливати на ефективність функціонування наноприладу. Розглянуто електронні стани у багатокаскадних наносистемах, що дозволило виявити неоднорідні розподіли густин імовірностей знаходження електрона у різних каскадах структури й показано що даний ефект може бути однією з причин низької ефективності переважної більшості реалізованих квантових каскадних детекторів. Побудовані теорії стаціонарних і квазістаціонарних станів електрона у багатокаскадних наносистемах, дали змогу оцінити енергії та часи життя електронних станів, а також розрахувати інтенсивності квантових переходів, що можуть бути безпосередньо застосованими для оптимізації дизайнів каскадів метою підвищення їх ефективності. Значну практичну цінність має також той факт, що наведені теоретичні результати поєднуються з результатами комп'ютерного, що дозволяє додатково оцінювати застосовність отриманих результатів й значно покращує їх інтерпретацію.

## **Публікація та апробація результатів дисертаційної роботи**

Результати наукових досліджень, що подано у дисертаційній роботі було опубліковано в 7 статтях у впливових високореєтингових фахових наукових виданнях та збірниках статей, що індексовані наукометричними базами Scopus та Web of Science з яких одна стаття віднесена до другого квартилю (Q2) і дві статті віднесені до третього квартилю (Q3) згідно класифікації Scimago Journal&Country Rank. Апробацію результатів дисертації було здійснено здійснення доповідей на 8 міжнародних конференціях, які підтверджено публікацією у збірниках тез доповідей. Дисертаційна робота повністю відповідає вимогам щодо академічної доброчесності.

## **Оформлення дисертаційної роботи**

Дисертаційна робота написана з дотриманням граматичних норм української мови при застосуванні всіх нормативних вимог до науково-технічної термінології. Матеріал дисертації викладено чітко та послідовно, він має логічну та взаємопов'язану структуру, яка відповідає хронологічному порядку отримання результатів дослідження. Дисертаційна робота повністю відповідає чинним вимогам щодо оформлення дисертаційних робіт, які подаються з метою отримання науково ступеня доктора філософії.

## Короткий зміст дисертаційної роботи та її аналіз

Дисертаційна робота Верешко Є.Ю. має загальний обсяг 185 сторінок машинописного тексту та структурно складається з анотації, вступу, оглядового розділу та основної частини, яка складається з трьох розділів. У цих розділах подано результати досліджень, що виконані дисертантом, загальні висновки до отриманих результатів. Далі міститься нумерований список використаних джерел та додатків.

В **Анотації** до дисертаційної роботи Верешко Є.Ю. висвітлено тематику наукових проблем, які вирішуються у дисертації, а також та огляд наукових результатів виконаних досліджень. Вкінці анотації міститься список публікацій здобувача, які складають зміст і наповнення дисертаційної роботи, а також підтверджують їх апробацію.

У **Вступі** здійснено обґрунтування вибору теми дисертації і її актуальність, сформульована мета, основні задачі, об'єкт та предмет дослідження, вказана наукова новизна і практична цінність отриманих результатів, подано інформацію про особистий внесок здобувача, апробацію роботи, її структуру та обсяг.

У **Першому розділі** здійснено огляд наукової літератури, віднесеної до експериментальних і теоретичних досліджень квантових каскадних детекторів. Виконано детальний аналіз розвитку експериментально створених квантових каскадних детекторів інфрачервоного та терагерцового діапазонів. обговорено різноманітні механізми вдосконалення їх функціональних характеристик, зокрема оптимізацією геометричного дизайну каскадів, підбором нових систем напівпровідникових матеріалів, поєднанням об'єктів різної просторової симетрії (наприклад, наноплівки, квантові точки, квантові дроти) тощо. Розглянуті основні теоретичні підходи і методи дослідження фотон- і фонон-супровідного тунелювання електронів крізь прецизійні елементи квантових каскадних детекторів. Відзначено, що у багатьох теоретичних працях використовується золоте правило Фермі, на основі якого розраховуються швидкості фотон-супровідних оптичних переходів для дослідження коефіцієнта поглинання та визначених ним фізичних величин або часів фонон-супровідних переходів у задачах про розсіювання електронів на фонах. Зроблено висновок, що у працях цього напрямку, як правило, дослідження виконуються або на основі спрощеної моделі окремої області каскаду, або у підході ідеалізованої нескінченної надгратки.

**Другий розділ** присвячений побудові квантово-механічної теорії електрон-фононної взаємодії у багатошаровій наноструктурі як каскаді квантового каскадного детектора та вивченню малодослідженого одночасного впливу всіх гілок обмежених та інтерфейсних фононів на спектральні характеристики електронних станів. Для цього у моделі ефективних мас для електрона та діелектричного континууму для обмежених та інтерфейсних фононів здійснено розрахунок енергетичних спектрів і хвильових функцій електрона й спектра енергій та потенціалів полів поляризації всіх гілок фононів, на основі яких отримані функції електрон-фононного зв'язку та з перших принципів визначено гамільтоніан системи у зображенні чисел заповнення за всіма змінними. Методом температурних функцій Гріна в однофононному наближенні точно розраховані масові оператори з урахуванням як

внутрішньорівневих, так і міжрівневих конфігураційних взаємодій. Дійсні та уявні частини відповідних масових операторів дозволили розрахувати параметри (зміщення та згасання) перенормування електронних станів взаємодією з фононами. На прикладі каскаду експериментального широкосмугового детектора далекого інфрачервоного діапазону з двоїною активною зоною досліджено еволюцію енергій електронних станів, перенормованих взаємодією зі всіма гілками обмежених та інтерфейсних фононів, залежно від товщини потенціального бар'єра в активній зоні при зміні температури у широкому інтервалі від криогенної до кімнатної. Отримані результати дозволили не лише встановити ступінь узгодження теоретичної моделі з експериментом, але й виявити фізичні ефекти, зумовлені електрон-фононною взаємодією. На основі розвиненої теорії аналізом енергетичного спектра електрона та сил осциляторів квантових переходів запропоновано оптимізований дизайн каскаду квантового каскадного детектора далекого інфрачервоного діапазону. Розділ завершується висновками.

**Третій розділ** присвячений побудові теорії стаціонарних станів електрона і сил осциляторів квантових переходів у закритій багатокаскадній наносистемі як основному структурному елементі квантового каскадного детектора. В цьому розділі досліджено властивості спектральних характеристик наносистеми, сформованих оптичними переходами між електронними станами. Хвильові функції та енергії електронних станів у багатокаскадній наноструктурі знаходилися у наближенні координато-залежних ефективних мас та прямокутних потенціалів як розв'язки стаціонарного рівняння Шредінгера з урахуванням умов нормування та умов неперервності функцій і потоків густин їх ймовірностей на всіх гетеромежах структури. На основі отриманих енергій та хвильових функцій здійснено розрахунок функцій густин ймовірностей знаходження електрона у каскадах наносистеми та сил осцилятора квантових переходів. Також розв'язана задача про енергетичний спектр і хвильові функції електрона в надгратці з потенціалом типу Кроніга-Пенні з періодом, який дорівнює окремому каскаду. З використанням побудованої досліджено властивості електронних станів і сил осцилятора квантових переходів у багатокаскадному основному структурному елементі експериментального квантового каскадного детектора, що дозволило виявити особливості формування смуги поглинання приладу у далекій ІЧ-області. Здійснено порівняльний аналіз еволюції властивостей електронних станів залежно від кількості каскадів і від їх геометричної конфігурації у закритій та надгратковій моделях. Розділ завершується висновками.

**Четвертий розділ** присвячений розробці теорії квазістаціонарних станів електрона у багатокаскадному елементі квантового каскадного детектора з використанням наближенні ефективних мас і прямокутних потенціалів із застосуванням методу трансфер-матриці отримані точні аналітичні вирази для S-матриці розсіювання, функції розподілу густини ймовірності та коефіцієнта прозорості у відкритій багатокаскадній резонансно-тунельній наноструктурі. Це дозволило розвинути у трьох підходах теорію спектральних характеристик (резонансних енергій та резонансних ширин). На прикладі відкритої багатокаскадної резонансно-тунельної наноструктури з трійними каскадами з GaAs-ямами та AlGaAs-бар'єрами досліджено еволюцію резонансних енергій та резонансних ширин



квазістаціонарних станів електрона залежно від кількості каскадів у наносистемі, здійснено порівняльний аналіз результатів трьох розвинених підходів. Проаналізовано вплив товщин внутрішньокаскадних і міжкаскадних потенціальних бар'єрів на спектральні характеристики електронних станів у відкритих резонансно-тунельних наноструктурах з різною кількістю каскадів. На основі визначених полюсами S-матриці резонансних енергій та ширин аналітично розрахована наближена функція розподілу густини ймовірності знаходження електрона у відкритій N-каскадній наноструктурі як нормована сума N-функцій Лоренца, яка дозволила показати, що виникаючий на залежностях функції густини ймовірності від енергій колапс резонансів зумовлений суперпозицією електронних станів з близькими значеннями резонансних енергій та суттєво різними резонансними ширинами (часами життя). Установлено, що у відкритій N-каскадній наносистемі виникають комплекси N-квазістаціонарних станів, резонансні енергії та резонансні ширини яких однозначно визначаються лише комплексними полюсами S-матриці. Досліджено еволюцію резонансних енергій та резонансних ширин квазістаціонарних станів електрона у відкритих багатокаскадних резонансно-тунельних наносистемах від товщин внутрішньокаскадних і міжкаскадних потенціальних бар'єрів, виявлено такі конфігурації, за яких структуру можна вважати закритою. Розділ завершується висновками.

Дисертаційна робота завершується **Основними результатами та висновками** в яких подано формулювання основних наукових результатів роботи. Далі йдуть **Додатки**, які містять **Список використаних джерел**.

## Зауваження

Подані результати наукової роботи Верешко Є.Ю. оцінюються виключно позитивно, однак хотів би зробити такі зауваження та коментарі до його дисертаційної роботи, які є незначними і абсолютно не применшують цінності отриманих наукових результатів:

- Розвинена теорія дозволяє розраховувати часи розсіювання за рахунок електрон-фононної взаємодії. Не цілком зрозуміло, чому це не було виконано, оскільки важливо було б порівняти часи життя електронних квазістаціонарних станів з цими величинами.
- Для електронного тунельного транспорту важливе місце має так-званий механізм "фононної драбинки". Чи можливі випадки, коли цей механізм руйнується через електрон-фононну взаємодію з оптичними фононами?
- Чи виконується правило сум при розрахунку сил осциляторів у випадку закритих багатокаскадних наносистем? Бажано б виконати перевірку цього факту хоча б на прикладі одної з актуальних геометричних конфігурацій досліджуваних наноструктур.

## Висновки

Дисертаційна робота Верешко Євгенії Юріївни є повнісною та логічно зв'язаною науковою роботою, в якій побудовано теоретичні моделі та виконано ґрунтовні теоретичні дослідження спектральних властивостей стаціонарних та квазістаціонарних станів електронів локалізованих у багат шарових плоских резонансно-тунельних системах, як функціонуючих елементах чи каскадах квантових каскадних детекторів. Розвинено теорію сил осциляторів квантових електронних переходів, та теорії взаємодії електронів з обмеженими та інтерфейсними оптичними фонами з широкому діапазоні температур. Для усіх теоретичних моделей виконано порівняння отриманих результатів з експериментом.

Таки чином, враховуючи виконаний аналіз поданих наукових результатів, дисертаційна робота Верешко Євгенії Юріївни " Теорія електронних станів та електрон-фононної взаємодії у структурних елементах квантових каскадних детекторів " за її актуальністю, науковою новизною, сумарним переліком отриманих результатів, а також їх взаємозв'язком та повнотою їх викладу в журнальних публікаціях, виконаною апробацією повністю відповідає вимогам "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 №44 зі змінами, внесеними згідно з Постановою Кабінету Міністрів України №341 від 21 березня 2022 року, а також "Вимогам до оформлення дисертації", затверджених Наказом Міністерства освіти і науки України №40 від 12 січня 2017 року, а автор дисертації Верешко Євгенія Юріївна заслуговує присудження їй наукового ступеня доктора філософії з галузі знань 10 Природничі науки за спеціальністю 104 Фізика та астрономія.

Офіційний опонент —

кандидат фізико-математичних наук, доцент,

доцент кафедри програмної інженерії

Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя

Ігор БОЙКО

Підпис кандидата фіз.-мат. наук,

доцента Ігоря БОЙКА засвідчую

Проректор з науково-педагогічної роботи

Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя

кандидат технічних наук, доцент



Степан ДЯЧУК