

ВИСНОВОК

**про наукову новизну, теоретичне і практичне значення
результатів дисертації Верешко Євгенії Юріївни на тему:
«Теорія електронних станів та електрон-фононої взаємодії у
структурних елементах квантових каскадних детекторів»,
поданої на здобуття ступеня доктора філософії
за спеціальністю 104 – «Фізика та астрономія»
в галузі знань 10 – «Природничі науки»**

1. Обґрунтування вибору теми дослідження та її зв'язок із планами наукових робіт Університету.

Не дивлячись на те, що за останні 15 років відбувся значний прогрес у створенні та вдосконаленні квантових каскадних детекторів інфрачервоного діапазону, ще й досі існують не до кінця з'ясовані питання щодо фізичних процесів, які відбуваються в наноструктурних елементах цих наноприладів. Зокрема, через громіздкість і складність квантово-механічного апарату у більшості теоретичних робіт, спрямованих на дослідження основних фізичних механізмів функціонування квантових каскадних детекторів, часто теорія будується на основі спрощених моделей або кількочислої області каскаду, або ідеалізованої нескінченної надґратки. У таких підходах, як правило, вивчаються властивості електронних станів, інтенсивностей квантових переходів та інших фізичних характеристик, що дозволяють зрозуміти загальні фундаментальні властивості досліджуваних наносистем, однак без врахування багатокаскадної структури реальних елементів квантових каскадних детекторів та часто нехтуючи впливом багатогілкових інтерфейсних і обмежених фононів на спектральні характеристики наноприладу.

Отже, побудова послідовної квантово-механічної теорії електронних станів, перенормованих взаємодією зі всіма гілками оптичних фононів, у реалістичних моделях багатокаскадних елементів квантових каскадних

детекторів є актуальним завданням, яке виконується у дисертаційному дослідженні.

Робота виконувалася згідно з програмою 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 низькорозмірних та 3d системах із метою оптимізації наноприладів» (№ державної реєстрації: 0116U004083).

Мета роботи полягає у побудові послідовної квантово-механічної теорії енергетичного спектра електрона, перенормованого взаємодією зі всіма гілками оптичних фононів у багатошаровому каскаді квантового каскадного детектора, а також стаціонарних і квазістаціонарних станів електрона у багатокаскадній наносистемі основного структурного елемента квантового каскадного детектора у закритій та відкритій моделях відповідно.

Методи дослідження

Теорії стаціонарних електронних станів у закритих багатошарових наносистемах та квазістаціонарних станів у відкритих резонансно-тунельних наноструктурах будувалися у моделі різних ефективних мас у ямах та бар'єрах структур з прямокутними потенціалами на основі точних аналітичних розв'язків стаціонарних рівнянь Шредінгера за умов неперервності хвильових функцій та потоків густин їх ймовірностей на всіх гетеромежах системи. Енергетичні спектри та потенціали полів поляризації обмежених й інтерфейсних фононів знаходилися у моделі ізотропного діелектричного континууму. Розрахунок перенормованих взаємодією з оптичними фононами електронних спектрів здійснювався у методі функцій Гріна на основі рівняння Дайсона з відомими масовими операторами. Розрахунок резонансних енергій та резонансних ширин квазістаціонарних станів здійснювався методами S-матриці розсіювання, функції густини ймовірності та коефіцієнта прозорості.

Об'єктом дослідження є багатошарові наноструктури закритого типу та резонансно-тунельні наносистеми відкритого типу на основі напівпровідникових систем матеріалів GaAs/Al_xGa_{1-x}As та In_xGa_{1-x}As/In_xAl_{1-x}As.

Предметом дослідження є енергетичні спектри та хвильові функції стаціонарних станів електрона й сили осцилятора квантових переходів у закритих багатокаскадних наносистемах; резонансні енергії та резонансні ширини квазістаціонарних станів електрона у відкритих багатокаскадних наносистемах; спектри енергій та потенціали полів поляризації обмежених й інтерфейсних фононів у багатошарових наноструктурах.

2. Формулювання наукового завдання, нове розв'язання якого отримано в дисертації

Наукові завдання, розв'язання яких отримано у дисертації, полягають у: побудові теорії перенормованого взаємодією з оптичними фононами енергетичного спектра електрона у каскаді квантового каскадного детектора та дослідженні впливу електрон-фононної взаємодії на спектральні характеристики смуги поглинання приладу; розвиненні теорії стаціонарних станів електрона у закритій багатокаскадній наноструктурі та вивченні властивостей електронних станів у багатокаскадному елементів квантового каскадного детектора; побудові послідовної теорії квазістаціонарних станів електрона у відкритій багатокаскадній резонансно-тунельній наноструктурі та дослідженні властивостей резонансних енергій та резонансних ширин електронних станів, визначених у підходах S-матриці, функції густини ймовірності й коефіцієнта прозорості. Ці нові завдання були повністю розв'язані у дисертації.

3. Наукові положення, розроблені особисто дисертантом, та їх новизна:

- Здійснила аналітичні та числові розрахунки масових операторів, що враховують взаємодію електрона з обмеженими та інтерфейсними фононами у багатошаровій наноструктурі. Це дозволило на прикладів каскаду

експериментального широкосмугового квантового каскадного детектора далекого ІЧ діапазону з двоємною активною зоною та шестиямним екстрактором встановити, що основний вклад у перенормування електронних станів зумовлений взаємодією з гілками високоенергетичної смуги інтерфейсних фононів, а вплив обмежених фононів виявляється на порядок меншим. Вперше показано, що якщо різниця між енергіями двох довільних станів електрона збігається з енергією поздовжнього фонона, відбувається різке зростання величин і зміщень, і затухань обох станів, зумовлених взаємодією з оптичними фононами у багат шаровому каскаді квантового каскадного детектора.

- Виконала аналітичні та числові розрахунки енергетичного спектра, густин ймовірностей знаходження електрона у шарах наноструктури і сил осцилятора у закритому багатокаскадному елементі квантового каскадного детектора; дисперсійного рівняння та хвильових функцій електрона у структурі з потенціалом типу Кроніга-Пенні. Вперше провела аналіз еволюції властивостей електронних станів, який показав, що у багатокаскадній наносистемі енергетичний спектр електрона характеризується квазідискретними смугами, кількість рівнів в яких дорівнює кількості каскадів. Ймовірності знаходження електрона у станах з енергіями з однієї зони можуть суттєво відрізнятися у різних каскадах, через що смуга поглинання квантового каскадного детектора формується квантовими переходами лише між тими станами, які характеризуються близькими просторовими розподілами ймовірностей знаходження.

- Виконала аналітичні та числові розрахунки S-матриці розсіювання, функції густини ймовірності та коефіцієнта прозорості, на основі яких розвинено теорію спектральних характеристик квазістаціонарних станів електрона у відкритій резонансно-тунельній наноструктурі з довільною кількістю однакових каскадів. Вперше 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.

На всіх етапах досліджень нових задач і розробки нових методів дисертантка приймала активну участь. Нею здійснено ґрунтовний аналіз отриманих результатів та сформовано висновки до кожного розділу дисертації.

4. Обґрунтованість і достовірність наукових положень, висновків і рекомендацій, які захищаються.

Достовірність наукових положень та висновків обґрунтована тим, що частина задач розв'язана точно із застосуванням добре апробованих теоретичних методів розрахунку дисперсійних рівнянь для енергій електронів та фононів, сил осцилятора квантових переходів, S -матриці розсіювання, функції густини ймовірності та коефіцієнта прозорості, а ті, які розв'язані наближено – перевірені на збіжність у граничних переходах та не суперечать фізичним міркуванням і принципам. Отримані результати та висновки узгоджуються з експериментальними результатами інших авторів.

Дисертація складається із вступу, чотирьох розділів, висновків до розділів, загальних висновків та списку використаних джерел. Дисертаційна робота є самостійною науковою працею. Висновки, рекомендації та пропозиції, що характеризують, зокрема, наукову новизну дослідження, сформовані автором дисертації.

Публікації (7 статей) у наукових журналах з теми дисертації висвітлюють проблематику та основні положення наукової роботи. Апробація основних результатів дисертації відбулася у формі доповідей на 8 наукових конференціях.

5. Рівень теоретичної підготовки здобувачки та рівень її обізнаності з результатами наукових досліджень інших науковців високий. Це видно, як з великої кількості використаних для огляду наукових джерел, так і з доповіді матеріалів дисертації.

Щодо особистого внеску здобувачки у розв'язання конкретного наукового завдання, то він також достатньо високий. Зокрема:

- дисертантка брала участь в обговоренні постановки задачі, визначенні мети роботи, виборі методів досліджень та у підготовці матеріалів до публікації у наукових журналах, представленні на наукових конференціях із доповіддю отриманих результатів.

- виконала розрахунок та аналіз залежностей енергетичного спектра, густин ймовірностей та сил осцилятора від кількості каскадів у закритій однокаскадній і багатокаскадній наноструктурах квантового каскадного детектора. Здійснила розрахунок дисперсійного рівняння та хвильових функцій електрона у багатокаскадній структурі з потенціалом типу Кроніга-Пенні.

- виконала аналітичні та числові розрахунки масових операторів, що враховують взаємодію електрона з обмеженими та інтерфейсними оптичними фононами у каскаді оптимізованого квантового каскадного детектора. Була задіяна у всіх етапах дослідження перенормованого фононами спектра електрона в каскаді експериментального квантового каскадного детектора.

- виконала аналітичні та числові розрахунки S-матриці розсіювання, функції густини ймовірності та коефіцієнта прозорості. Брала активну участь у розвиненні теорії та дослідженні властивостей спектральних характеристик квазістаціонарних станів електрона у відкритій багатокаскадній резонансно-тунельній наноструктурі.

- брала участь в обговоренні комп'ютерного алгоритму аналітичного розрахунку мультиплікативних діаграм масового оператора системи дворівневої квазічастинки з виродженим збудженим рівнем, взаємодіючої з одномодовими поляризаційними фононами.

6. Наукове та практичне значення роботи.

Важливе наукове значення дисертаційної роботи полягає в тому, що в ній розвинена послідовна теорія електрон-фононної взаємодії в окремому

багатошаровому каскаді та стаціонарних і квазістаціонарних станів електрона у багатокаскадних елементах квантових каскадних детекторів. Ця теорія відкриває шлях для розуміння цілісної картини фізики функціонування квантового каскадного детектора.

Важливе практичне значення роботи полягає у тому, що:

- Розвинена теорія електрон-фононої взаємодії у каскаді квантового каскадного детектора дозволила виявити умови, за яких величини зміщень та затухань електронних станів, зумовлені взаємодією з оптичними фононами, різко зростають. Знайдені геометричні конфігурації двоямної активної зони квантового каскадного детектора далекого інфрачервоного діапазону, за яких виявлений ефект найбільше проявляється і може впливати на ефективність функціонування наноприладу.

- Запропонована теорія електронних станів у багатокаскадних наносистемах виявила неоднорідні розподіли густин ймовірностей знаходження електрона у різних каскадах структури, що може бути однією з причин низької ефективності переважної більшості експериментальних квантових каскадних детекторів.

- Розвинені теорії стаціонарних та квазістаціонарних станів електрона у багатокаскадних наносистемах, які дозволяють оцінити енергії та часи життя електронних станів, а також інтенсивності квантових переходів, можуть бути важливі у задачах про оптимізацію дизайнів каскадів квантових каскадних детекторів з метою підвищення їх ефективності.

Також результати дисертаційного дослідження можуть використовуватися у навчальному процесі при підготовці відповідних спецкурсів, а також для написання спеціалізованих посібників і підручників по квантовій теорії фізики наногетеросистем.

7. Повнота викладу матеріалів дисертації в публікаціях та особистий внесок здобувачки в публікації.

Особистий внесок здобувача в публікації такий, який вказаний у пункті 5 цього висновку.

Результати перевірки тексту дисертації з використанням антиплагіатної системи UNICHECK показав на 2.98% схожості з джерелами з Інтернету. Робота відповідає принципам академічної доброчесності.

Основні положення і висновки дисертаційної роботи викладені у 7 наукових працях. Зокрема, всі вони індексовані у Scopus (дві Q=3, чотири Q=4), а 2 з них і в Web of Science.

Матеріали дисертації доповідалися і опубліковані у 8 тезах доповідей на міжнародних наукових конференціях.

Результати дисертації повною мірою викладені в зазначених публікаціях.

Статті у наукових фахових виданнях України, проіндексованих у базах даних Web of Science Core Collection та/або Scopus:

1. Seti Ju.O., Tkach M.V., Vereshko E.Ju., Voitsekhivska O.M. Modeling of optimized cascade of quantum cascade detector operating in far infrared range. *Mathematical Modeling and Computing*. 2020. Vol. 7, no. 1. P. 186–195..

2. Сеті Ю.О., Верешко Є.Ю., Ткач М.В., Войцехівська О.М. Особливості перенормування оптичними фононами електронного спектра в каскаді квантового каскадного детектора / Peculiarities of electron spectrum renormalized by optical phonons in the cascade of quantum cascade detector. *Журнал фізичних досліджень / Journal of Physical Studies*. 2021. Vol. 25, no. 3. P. 3706.

3. Seti Ju.O., Tkach M.V., Vereshko E.Ju. Effect of Confined Phonons on Temperature Renormalization of Spectral Characteristics of Quantum Cascade Detector Operating in Far Infrared Range. *Journal of Nano- and Electronic Physics*. 2021. Vol. 13, no. 2. P. 02031.

4. Сеті Ю.О., Верешко Є.Ю., Ткач М.В. Властивості електронних станів у закритій нанокаскадній структурі як елементі квантового каскадного детектора / Properties of electron states in a closed multi-cascade nanostructure being an element of a quantum cascade detector. *Журнал фізичних досліджень / Journal of Physical Studies*. 2022. Vol. 26, no. 4. P. 4702.

Статті у періодичних наукових виданнях, проіндексованих у базах даних Web of Science Core Collection та/або Scopus:

5. Tkach M., Seti J., Voitsekhivska O., Gutiv V., Vereshko E. Properties of renormalized spectrum of interacting with polarization phonons localized quasiparticle with degenerated excited state. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. 2020. Vol. 701, no. 1. P. 48–58.

6. Seti J., Voitsekhivska O., Vereshko E., Tkach M. Effect of interface phonons on the functioning of quantum cascade detectors operating in the far infrared range. *Applied Nanoscience* (Switzerland). 2022. Vol. 12, no. 3. P. 533-542.

7. Seti Ju., Vereshko E., Voitsekhivska O., Tkach M. Properties of spectral parameters of multicascade nanostructure being a model of quantum cascade detector. *Springer Proceedings in Physics. Nanomaterials and Nanocomposites, Nanostructure Surfaces, and Their Applications: 10th International Research and Practice Conference on Nanotechnology and Nanomaterials (NANO 2021)*. Lviv 25-28 August 2021. 2023. Vol. 279, P. 361 – 376.

Публікації які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

8. Сеті Ю.О., Ткач М.В., Верешко Є.Ю. Спектральні властивості широкосмугового квантового каскадного детектора далекого ІЧ-діапазону з двоямною активною зоною. Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології (НАНСИС-2019): Тези VI Наук. конф. (Київ, 4–6 грудня 2019 р.) / редкол.: А. Г. Наумовець [та ін.]. Київ, 2019. С. 151.

9. Tkach M., Seti Ju., Voitsekhivska O., Hutiv V., Ivanochko M., Vereshko E. Properties of renormalized spectrum of interacting with polarization phonons localized quasiparticle with degenerated excited state. The International research and practice conference “Nanotechnology and nanomaterials” (NANO-2019): Abstract Book of participants of the International research and practice conference (Lviv, 27 – 30 August 2019) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC «Computer-publishing, information center», 2019. P. 576.

10. Vereshko E.Ju., Seti Ju.O., Tkach M.V. Effect of interface phonons on the electron spectrum in far infrared range quantum cascade detector at cryogenic

temperature. Proceedings of the 2020 IEEE 10th International Conference on "Nanomaterials: Applications and Properties" (NAP 2020). 2020. P. 9309532. (Scopus)

11. Seti Ju.O., Tkach M.V., Vereshko E.Ju., Voitsekhivska O.M. Effect of interface phonons on the functioning of quantum cascade detectors operating in far infrared range. The International research and practice conference "Nanotechnology and nanomaterials" (NANO-2020): Abstract Book of participants of the International research and practice conference (Lviv, 26 – 29 August 2020) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC «Computer-publishing, information center», 2020. P. 469.

12. Seti Ju.O, Vereshko E.Y., Voitsekhivska O.M., Tkach M.V. Spectral properties of open multi-cascade nanostructure as an element of quantum cascade detector. XVIII International Freik Conference Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems. Materials. / Ed. by Prof. V.V. Prokopiv. Ivano-Frankivsk: Publisher Vasyl Stefanyk Precarpathian National University, 2021. P. 51.

13. Сеті Ю.О., Ткач М.В., Верешко Є.Ю. Перенормування електронного спектра взаємодією з обмеженими фононами у оптимізованому каскаді квантового каскадного детектора. 9-та Міжнародна науково-технічна конференція "Сенсорна електроніка та мікросистемні технології" (СЕМСТ-9): матеріали Міжнар. наук.-техн. конф., Одеса, 20-24 вересня 2021. Одеса, 2021. С. 36.

14. Seti Ju., Vereshko E., Voitsekhivska O., Tkach M., Markin O. Properties of transmission coefficient of multicascade element in quantum cascade detector // The International research and practice conference "Nanotechnology and nanomaterials" (NANO-2021): Abstract Book of participants of International research and practice conference (Lviv, 25 – 27 August 2021) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC «Computer-publishing, information center», 2021. P. 420.

15. Seti Ju., Vereshko E., Voitsekhivska O., Tkach M. Properties of electron states in open multi-cascade nanostructure: S-matrix, transmission coefficient and probability function methods. The International research and practice conference "Nanotechnology and nanomaterials" (NANO-2022): Abstract Book of participants of the International research and practice conference (Lviv, 25–27 August 2022) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC APF POLYGRAPH SERVICE, 2022. P. 444.

8. Апробація матеріалів дисертації здійснювалася на таких конференціях:

1. VI Наукова конференція «Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології» (НАНСИС-2019), 4–6 грудня, 2019, Київ, Україна.

2. 7th International research and practice conference «Nanotechnology and nanomaterials» (NANO-2019), 27 – 30 August, 2019, Lviv, Ukraine.

3. 10th International Conference on «Nanomaterials: Applications and Properties» (NAP 2020), 9-13 November, 2020, Sumy, Ukraine

4. 8th International research and practice conference «Nanotechnology And Nanomaterials» (NANO–2020), 26–29 August, 2020, Lviv, Ukraine.

5. 9th International Conference «Nanotechnologies and Nanomaterials» (NANO–2021), 25–27 August, 2021, Lviv, Ukraine.

6. XVIII International Freik Conference Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems. Materials, 11–16 October, 2021, Ivano-Frankivsk, Ukraine.

7. 9-та Міжнародна науково-технічна конференція «Сенсорна електроніка та мікросистемні технології» (СЕМСТ–9), 20–24 вересня, 2021, Одеса, Україна.

8. 10th International research and practice conference «Nanotechnology And Nanomaterials» (NANO–2022), 25–27 August, 2022, Lviv, Ukraine.

9. Оцінка мови і стилю дисертації.

Мова і стиль дисертації відповідають вимогам, що висуваються до праць такого рівня.

10. Відповідність змісту дисертації спеціальності з відповідної галузі знань, з якої вона подається до захисту.

Зміст дисертації відповідає чинним вимогам до оформлення дисертації, встановленим освітньо-науковою програмою «Фізика та астрономія» галузі знань 10 «Природничі науки», спеціальності 104 «Фізика та астрономія».

11. Дотримання нормативних вимог щодо оформлення дисертації.

Нормативні вимоги щодо оформлення дисертації дотримані повністю.

12. Рекомендації дисертації до захисту.

Дисертаційна робота Верешко Євгенії Юріївни «Теорія електронних станів та електрон-фононої взаємодії у структурних елементах квантових каскадних детекторів», подана на здобуття ступеня доктора філософії у галузі знань 10 – «Природничі науки» за спеціальністю 104 – «Фізика та астрономія», за її актуальністю, науково-теоретичним рівнем, новизною постановки та розв'язання проблеми, практичним значенням отриманих результатів відповідає вимогам пунктів 6, 7, 8, 9 «Порядком 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 від 12 січня 2022р. №44 (із змінами, внесеними згідно з Постановою Кабінету Міністрів України №431 від 21.03.2022 р.), за результатами публічної презентації результатів дисертації та їх обговорення на засіданні кафедри інформаційних технологій та комп'ютерної фізики Інституту фізико-технічних та комп'ютерних наук Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича 1 червня 2023 року дисертацію Верешко Євгенії Юріївни рекомендовано до захисту в разовій спеціалізованій вченій раді для здобуття ступеня доктора філософії.

Голова засідання,



Мар'яна БОРЧА

Завідувач кафедри

Інформаційних технологій

та комп'ютерної фізики

Чернівецького національного

університету імені Юрія Федьковича,

доктор фізико-математичних наук, снс

Після засвідчує
Учений секретар Чернівецького національного
університету імені Юрія Федьковича
" 2 " червня 2023 р.

