

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 Гутіва Василя Володимировича
на тему: **“Теорія перенормованого спектру багатозонних квазічастинок взаємодіючих
з поляризаційними фононами”**,
яка подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії в галузі знань
10 Природничі науки за спеціальністю 104 Фізика та астрономія

Дисертаційна робота Гутіва Василя Володимировича присвячена розробці теорії та методів теоретичного дослідження. Проведений аналіз дисертаційної роботи Гутіва В.В. “Теорія перенормованого спектру багатозонних квазічастинок взаємодіючих з поляризаційними фононами” показує її приналежність до наукової школи теоретичної фізики Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича, а сама тематика досліджень безпосередньо відноситься до багаторічної наукової тематики кафедри теоретичної фізики та комп’ютерного моделювання. Також результати проведеного аналізу дозволяють сформулювати нижче подані висновки щодо актуальності результатів поданих у дисертації, ступеню обґрунтованості основних наукових положень, достовірності та меж їх застосовності, наукової новизни, практичного значення та області їх застосовності, а також стосовно загальної оцінки дисертаційної роботи.

Актуальність дисертаційної роботи

Електронний тунельний транспорт у напівпровідникових низьковимірних системах різної симетрії є основою роботи наноприладів працюючих у широких діапазонах електромагнітних хвиль. Зокрема квантові переходи між електронними квазістаціонарними станами плоских резонансно-тунельних структур визначають робочі характеристики квантових каскадних лазерів та детекторів.

Спрощене описання електронних процесів, електрон-фононної взаємодії у таких наноструктурах відбувається виключно у моделі закритих наносистем, де електронні стани є стаціонарними, що значно спрощує математичний апарат. Для відкритих наносистем є необхідність врахування факту внеску фононних підсистем у рамках теорії когерентного транспорту, задачах, що виникають у теоретичних моделях фонон-супровідного тунелювання. Теоретичні основи відшукування розв’язків рівняння Шредінгера з потенціалами поляризації в однофотонних і багатофононних випадках, часто демонструють необґрунтоване застосування теорії збурень, зокрема слід виділити аспекти, коли ряди теорії збурень необґрунтовано обривались, або взагалі нехтувалось їхньою розбіжністю. Кардинально інший тип задач виникає при розгляді систем електронів різними типами фононів у нітридних наносистемах. Зокрема у так-званих короткоперіодних квантових

каскадних детекторах має місце виникнення “паразитних” каналі провідності, асоційованих із одно- або багатофоновими процесами. З теоретичної точки зору такий ефект зумовлений перенормування електронного спектру взаємодією з фононами, що спричиняє появу додаткової фази у електронної хвильової функції й порушенні когерентного режиму тунелювання. Розв’язання такої задачі у загальному випадку й подальше застосування такої розвиненої теорії до реальних наносистем безумовно є актуальною задачею, оскільки дасть змогу поглянути на суть процесів у оптоелектронних наноприладах, глибше зрозуміти їхню природу та роль у їхньому функціонуванні.

Розв’язання згаданої задачі є знаковим завданням квантової теорії низьковимірних систем, яке можна вирішити шляхом імплементації методів сучасної квантової теорії поля. Існуючий стандартний підхід діаграмної техніки Фейнмана в методі функцій Гріна, при застосуванні до задач перенормування енергетичного спектра багатозонних квазічастинок шляхом врахування взаємодії з багатомодовими фононами поляризаційного типу є незастосовним. Для вирішення цієї задачі необхідно кардинально змінити методологію розрахунку масового оператора. Крім того сама структура масового оператора має бути окремо проаналізованою для кожного конкретно взятого типу багатофонових процесів. Розв’язанню такою актуальної задачі, власне і присвячена дисертація Гутіва В.В.

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 низькорозмірних та 3d системах із метою оптимізації параметрів наноприладів» (номер Держреєстрації 0116U004083) та «Квантова теорія фізичних явищ і процесів у низьковимірних системах різної симетрії як основних елементах сучасних наноприладів» (номер Держреєстрації 0121U109823).

Обґрунтованість та достовірність одержаних результатів поданих у дисертаційній роботі забезпечується встановленням коректності постановок досліджуваних наукових проблем та порівнянням отриманих теоретичних результатів з експериментальними даними. У безпосередніх дослідженнях дисертант використовував ефективні сучасні методи теоретичної фізики та добре зарекомендований математичний апарат адаптований з квантової теорії поля такий як: рівняння Шредінгера, 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, які подані в дисертаційній роботі є новими, актуальними та оригінальними. Основні наукові результати, що характеризують суть та зміст дисертаційної роботи є такими:

- I. Уперше запропоновано новий геометричний дизайн каскаду квантового каскадного детектора далекого інфрачервоного діапазону. Його каскади складаються з ізотропних матеріалів квантових ям і бар'єрів з близькими розмірами елементарних комірок. Показано, що на відміну від анізотропних матеріалів на межах квантових ям і бар'єрів практично не виникають напруги, які суттєво погіршують роботу наноприладів через виникнення "паразитних" каналів провідності. Обґрунтовано, що активна область нанофотодетектора має складатися з каскадів глибоких і широких квантових ям з інверсованою структурою внутрішніх малих квантових ям і бар'єрів. Зміна їхніх розмірів і величин потенціалів дозволяє значно збільшити сили осциляторів квантових переходів електронів під дією поля. Це дозволяє отримати зростання відношення ширини до довжини хвилі смуги поглинання електромагнітного поля далекого інфрачервоного діапазону, що на практиці дозволить покращити ефективність роботи реальних наноприладів.
- II. - Уперше запропоновано узагальнення діаграмної техніки Фейнмана для розрахунку масового оператора функції Гріна багаторівневої квазічастинки, взаємодіючої з одномодовими поляризаційними фононами. Розроблено новий метод ефективного врахування багатофонових процесів шляхом виділення мультиплікативних з немультіплікативних діаграм масового оператора з наступним парціальним їх підсумовуванням; - уперше показано, що розвинений метод узагальненої діаграмної техніки є успішно застосовним для систем як і з виродженням, так і з невиродженням енергетичними спектрами багаторівневих квазічастинок, взаємодіючих з довільним числом поляризаційних фонових при $T=0K$. Запропонований підхід ефективно враховує багатофонові процеси, долаючи відому «проблему знака», яка виникає у класичній квантовій теорії поля.
- III. - Уперше показано, що незалежно від констант взаємодії (λ_a) і від співвідношень між величинами енергій усіх фонових мод, перенормовані спектри квазічастинок стаціонарні (незатухаючі) і дискретні, причому основний і перший сателітні рівні є невиродженими, а решта сателітної частини спектра суттєво залежить від співвідношень між енергіями фонових мод. Встановлено, що енергії всіх мод є кратні найменшій, то тоді спектр буде еквідистантним і виродженим. При цьому, якщо хоча б одна з мод не кратна до іншої, а інші кратні між собою, то спектр не еквідистантний і частково вироджений. Якщо відношення мод є ірраціональними числами, то спектр не вироджений і не еквідистантний.

- IV. Уперше виконано точний розрахунок і аналіз середніх чисел фононів у сателітних станах. За результати таких розрахунків виявлено, що, незалежно від τ , λ_α і λ_Ω , всі вони є сильно зв'язаними фононоподібними комплексами. Лише в основному стані при збільшенні λ_α квазічастинка змінює свої властивості від майже квазічастинкових з малою слабкою фононною підсистемою через гібридний комплекс аж до сильно зв'язаного фононоподібного комплексу. Для такої системи однорівневих квазічастинок взаємодіючих з довільним числом мод поляризаційних фононів у моделі Давидова вперше точно розраховано перенормований спектр. При цьому на відміну від результатів відомої раніше наближеної теорії, де отримано нефізичне затухання спектру при $T=0\text{K}$, тепер чітко показано, що він залишається незатухаючим і дискретним з основним та з виродженими й невиродженими сателітними станами.
- V. З використанням параметрів одно-, дво- і тримодових систем з феноменологічним затуханням при $T=0\text{K}$ вперше отримано і проаналізовано частотну залежність функцій форми смуги поглинання та її спектральних параметрів у широкому діапазоні енергій, який містить головні й відповідні їм сателітні піки фононних повторень.

Практичне значення отриманих результатів дисертаційної роботи

Отримані здобувачем теоретичні результати, що викладені в дисертаційній роботі спрямовані на з'ясування природи і розуміння процесів взаємодії квазічастинок у складних напівпровідникових системах різної геометричної розмірності. Розглянуто теоретичні аспекти функціонування й оптимізації параметрів активного елемента широкосмугового детектора далекого інфрачервоного діапазону електромагнітних хвиль із новим типом його енергетичної схеми. Основну частину дисертації відведено створенню давидівської моделі системи, що відповідає теорії перенормування спектрів багаторівневої квазічастинки взаємодіючої з одномодовими фононами, а також однорівневої квазічастинки, що взаємодіє з багаторівневими фононами з при урахуванні багатофононних процесів, що мають місце у багатошарових напівпровідникових наноструктурах. В дисертаційній роботі відведено значну увагу проведенню комп'ютерного моделювання із застосування розвиненої теорії до безпосередніх наносистем, що дозволяє додатково оцінювати застосовність отриманих результатів та їх практичну цінність завдяки безпосередній наочності.

Публікація та апробація результатів дисертаційної роботи

Результати наукових досліджень, що подано у дисертаційній роботі було опубліковано в 6 статтях у впливових високорейтингових фахових наукових виданнях, що індексовані наукометричними базами Scopus та Web of Science з яких одна стаття віднесена до другого квартилю (Q2) і одна стаття віднесена до третього квартилю (Q3) згідно класифікації Scimago Journal&Country Rank. Апробацію результатів дисертації виконано шляхом здійснення доповідей на 5 міжнародних конференціях, які підтверджено публікацією

відповідних тез доповідей. Дисертаційна робота повністю відповідає вимогам щодо академічної доброчесності.

Оформлення дисертаційної роботи

Дисертаційна робота написана з дотриманням граматичних норм української мови забезпеченням застосування усіх аспектів науково-технічної термінології. Матеріал дисертації викладено чітко та послідовно, він має логічну та взаємопов'язану структуру, яка відповідає отриманню результатів дослідження. Дані факти є чинниками доступності сприйняття наукових результатів, що подані у дисертації. 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 Гутіва В.В. має загальний обсяг 176 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 Гутівим В.В. висвітлено тематику наукових проблем, які вирішуються у дисертації, а також та огляд наукових результатів виконаних досліджень. Вкінці анотації міститься список публікацій здобувача, що складають зміст і наповнення дисертаційної роботи та підтверджують їх апробацію.

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

У **Першому розділі** виконано короткий огляд і аналіз наукової літератури стосовно ідей, які стосуються фізичних принципів та методів вдосконалення параметрів функціонуючих наноприладів – квантових каскадних детекторів різних частотних робочих діапазонів. Проаналізовано сучасні експериментальні підходи до покращення робочих параметрів наноприладів у вікнах атмосферної прозорості інфрачервоного діапазону. Встановлено факт існування нормально функціонуючих квантових каскадних детекторів зі «спотвореними» або й «обірваними», так званими «фононними» драбинками їх екстракторів, що, згідно зі стандартними уявленнями, щодо функціонування наноприладів за рахунок когерентного електронного транспорту не є можливим. Було сформульовано припущення про те, що відсутні енергетичні рівні в драбинках можуть бути заміщені наявними в системі рівнями зв'язаних станів електронів з оптичними фононами. Зроблено висновок, що оскільки в непертурбативних підходах таких як теорія збурень, метод матриці густини, варіаційний метод ефективно врахувати багатофотонні процеси здійснити важко, то потрібно застосувати модифіковані підходи сучасної квантової теорії поля.

Другий розділ присвячений створенню квантової теорії спектральних параметрів і сил осциляторів квантових переходів електронів при їх фононсупровідному тунелюванні крізь каскади активної області широкосмугового нанофотодетектора далекого. Щоб забезпечити достатню ширину смуги поглинання фотодетектора й уникнути появи значного темного струму, запропоновано новий просторовий дизайн його основної області, який створює односторонній рух електронів без прикладання зовнішнього постійного електричного поля. Розглянуто активну область нанодетектора, яка містить N однакових каскадів, кожен з яких складається з однієї безструктурної квантової ями і двох груп квантових ям з внутрішньою структурою. Висоти потенціальних бар'єрів (U) і півширини (d) та інверсовані потенціали ($\pm V$) внутрішніх ям і бар'єрів порівняно малі. У моделі ефективної маси електрона у різних шарах наносистеми з потенціальним рельєфом описаних вище каскадів активної області розв'язане стаціонарне рівняння Шредінгера для кожної окремої квантової ями. З урахуванням граничних умов на хвильові функції, та потоків ймовірностей їх густин разом з умовами нормування знаходяться точні розв'язки хвильових функцій, енергетичний спектр та сили осциляторів квантових переходів з основного на збуджений рівень кожної квантової ями. На основі розвиненої теорії виконаний розрахунок спектральних параметрів каскадів та здійснено їх оптимізацію залежно від величин потенціалів U і V та геометричних розмірів D і d . Як складові елементи каскаду вивчалися наносистеми виду $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ з малими внутрішніми бар'єрами $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ та з малими внутрішніми ямами $\text{Ga}_y\text{In}_{1-y}\text{As}$. Такий вибір сполук зумовлений тим, що в них близькі розміри елементарних комірок, що забезпечує отримання хороших результатів з використанням моделі ефективних мас для квазічастинок. Розділ завершується висновками.

Третій розділ присвячений розробці методу послідовного виділення й парціального підсумовування мультиплікативних діаграм масового оператора в теорії перенормування вироджених і невироджених спектрів багаторівневих квазічастинок взаємодіючих з багатьма одномодовими фононами. Перенормований електронний спектр системи, до якої входить довільна кількість (τ) багаторівневих квазічастинок, що взаємодіють з одномодовими поляризаційними фононами й описується гамільтоніаном Фреліхівського типу, розраховується методом діаграмної техніки Фейнмана в теорії функцій Гріна. При $T=0\text{K}$ для Фур'є-образу квазічастинкових функцій Гріна утворюються 2τ рівнянь, які пов'язують ці функції з повним матричним масовим оператором системи. Систему рівнянь розв'язано точно й отримано узагальнене рівняння Дайсона, яке встановлює аналітичний зв'язок між функцією Гріна та масовими операторами. Для того, щоб одержати перенормований спектр системи в широкому діапазоні енергій, який містить і головні, і сателітні стани, в масовому операторі необхідно враховано діаграми вищих порядків і за степенями функцій зв'язку, і за кількістю фононних енергій. Для цього застосовано підхід парціального підсумовування мультиплікативних діаграм. Враховуючи багаторівневність вихідного спектру квазічастинок у всіх вищих порядках складових масового оператора наявні й мультиплікативні, і немультіплікативні діаграми. Для того, щоб врахувати цей факт був запропонований метод поступового й послідовного виділення з усіх немультіплікативних діаграм фіксованого порядку суми всіх мультиплікативних діаграм менших порядків з наступним парціальним підсумовуванням нових безмежних рядів мультиплікативних діаграм. Застосування

розвинутого методу до задачі про взаємодію багаторівневих частинок з виродженими й невиродженими станами з численними одномодовими фононами дозволило отримати перенормовані спектри систем з головним і сателітним станами та встановити їх властивості коректно, уникнувши відомої «проблеми знаку» в масовому операторі. Розділ завершується висновками.

Четвертий розділ присвячений побудові послідовної квантової теорії перенормованого спектра й середніх (ефективних) чисел фононів у всіх станах системи на основі гамільтоніана Фроліха в моделі Давидова вузькозонної квазічастинки, взаємодіючої з численними поляризаційними фононами довільної кількості (τ) мод при $T=0\text{K}$, вперше. За допомогою точного розрахунку фур'є-образа запізнюючої функції Гріна квазічастинки вперше отримані аналітичні вирази для перенормованого спектра та ефективних (середніх) чисел фононів у всіх станах системи з довільним числом (τ) фононних мод. Розраховано й детально проаналізовано перенормовані спектри й ефективні (середні) числа фононів у всіх станах одно-, дво- і три- модових систем. 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 робота Гутіва В.В. оцінюються виключно позитивно, однак хотів би зробити такі зауваження та коментарі до його дисертаційної роботи, які є незначними і в основному стосуються технічних аспектів подання тексту і абсолютно не применшують цінності отриманих наукових результатів:

- У тексті зустрічається описка “діаграмна техніка Феймана” замість “діаграмна техніка Фейнмана” (очевидно вона спричинена опцією автозаміни текстового редактора).
- На сторінці 28 дисертант згадує себе у жіночому роді (фраза “список публікацій здобувачки за темою дисертації”).
- Результати розрахунку масового оператора, що є достатньо громіздкими можна було б помістити у додатки, оскільки в подальших розрахунках дисертант до них безпосередньо не звертається.
- Враховуючи аналітичну складність розвинутої теорії, бажано було б приділити кілька речень у тексті дисертації стосовно підходів до розрахунків, виконуваних на основі розвинутої теорії: яке програмне забезпечення використовувалось, числові методи, а також як здійснювалось подання графічного матеріалу. Сам такий програмний код, особливо такий, який стосується розрахунку масового оператора, що має загальний характер також можна було б розмістити у додатках.

Висновки

Дисертаційна робота Гутіва Василя Володимировича є закінченою та цілісною науковою роботою, в якій проведені ґрунтовні теоретичні дослідження спектральних властивостей багатозонних квазічастинок та отримано ряд актуальних результатів, що узагальнюють та доповнюють теорію давидівської моделі перенормування спектру квазічастинок шляхом врахування механізмів їх взаємодії як з одномодовими фонами так і з багатофонними підсистемами, що є важливим аспектом для теорії, що описує взаємодію квазічастинок у багат шарових наносистемах із різною геометричною симетрією.

Отже, враховуючи наведений вище аналіз поданих наукових результатів, дисертаційна робота Гутіва Василя Володимировича “ Теорія перенормованого спектру багатозонних квазічастинок взаємодіючих з поляризаційними фонами” за безпосередньою актуальністю, науковою новизною, загальним переліком отриманих результатів, а також їх взаємозв’язком та повнотою їх викладу в журнальних публікаціях та апробації цілком 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 Гутів Василь Володимирович заслуговує присудження йому 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 засвідчує

Проректор з наукової роботи

Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя

доктор технічних наук, професор



 Павло МАРУЩАК