Затверджую
Директор Інституту фізики
конденсованих систем НАН України
д.ф.-м.н., проф., чл.-кор. НАН України
_____ Т. М. Брик
"15" жовтня 2024 р.

ВИТЯГ
з протоколу № 1256 фахового семінару
Інституту фізики конденсованих систем НАН України
від 10 жовтня 2024 р.

1. ПРИСУТНІ 41 працівник Інституту фізики конденсованих систем НАН України, а саме:

1. Остап Романович БАРАН, кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник;
2. Ірина Степанівна БЗОВСЬКА, кандидат фізико-математичних наук, вчений секретар;
3. Вікторія Богданівна БЛАВАЦЬКА, доктор фізико-математичних наук, завідувач лабораторії статистичної фізики складних систем;
4. Тарас Михайлович БРИК, доктор фізико-математичних наук, професор, член-кореспондент НАН України, директор Інституту фізики конденсованих систем НАН України;
5. Галина Анатоліївна БУТОВИЧ, аспірант;
6. Андрій Степанович ВДОВИЧ, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;
7. Олег Володимирович ВЕЛИЧКО, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;
8. Тарас Михайлович ВЕРХОЛЯК, кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;
9. Христина Аркадіївна ГАЙДУКІВСЬКА, кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник;
10. Тарас Юрійович ГОЛОВАЧ, кандидат фізико-математичних наук, молодший науковий співробітник;
11. Юрій Васильович ГОЛОВАЧ, доктор фізико-математичних наук, професор, академік НАН України, головний науковий співробітник;
12. Мирослав Федорович ГОЛОВКО, доктор фізико-математичних наук, професор, член-кореспондент НАН України, головний науковий співробітник;
13. Йосип Андрійович ГУМЕНЮК, кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник;
14. Тарас Ігорович ГУТАК, доктор філософії, молодший науковий співробітник;
15. Тарас Васильович ДЕМЧУК, доктор філософії, молодший науковий співробітник;
16. Оксана Андріївна ДОБУШ, кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник;
17. Данило Андрійович ДОБУШОВСЬКИЙ, молодший науковий співробітник;
18. Максим Юрійович ДРУЧОК, кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;

19. Максим Леонідович ДУДКА, доктор фізико-математичних наук, завідувач відділу статистичної теорії конденсованих систем;
20. Олександр Львович ІВАНКІВ, кандидат фізико-математичних наук, заступник директора з наукової роботи;
21. Василь Васильович ІГНАТЮК, кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;
22. Ілля-Микола Анджейович ІЛЕНКОВ, аспірант;
23. Ігор Володимирович ЇДАК, молодший науковий співробітник;
24. Остап Юрійович КАЛЮЖНИЙ, кандидат фізико-математичних наук, молодший науковий співробітник;
25. Марія Ярославівна КОРВАЦЬКА, молодший науковий співробітник;
26. Іван Ярославович КРАВЦІВ, кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник;
27. Мар'яна Богданівна КРАСНИЦЬКА, кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;
28. Олеся Михайлівна КРУПНІЦЬКА, кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник;
29. Богдан Михайлович ЛІСНИЙ, кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;
30. Ігор Миронович МРИГЛОД, доктор фізико-математичних наук, академік НАН України, головний науковий співробітник;
31. Оксана Вадимівна ПАЦАГАН, доктор фізико-математичних наук, провідний науковий співробітник;
32. Тарас Миколайович ПАЦАГАН доктор фізико-математичних наук, заступник директора з наукової роботи;
33. Ігор Васильович ПИЛЮК, доктор фізико-математичних наук, провідний науковий співробітник;
34. Роман Васильович РОМАНІК, кандидат фізико-математичних наук, докторант;
35. Роман Ярославович СТЕЦІВ, кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;
36. Дмитро Юрійович ШАПОВАЛ, доктор філософії, молодший науковий співробітник;
37. Андрій Михайлович ШВАЙКА, доктор фізико-математичних наук, провідний науковий співробітник;
38. Микола Адріанович ШПОТ, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;
39. Ярослав Йосифович ЩУР, доктор фізико-математичних наук, провідний науковий співробітник;
40. Юрій Григорович ЯРЕМКО, доктор фізико-математичних наук, провідний науковий співробітник;
41. Дмитро Любомирович ЯРЕМЧУК, доктор філософії, докторант.

На засідання запрошені:

1. Володимир Анатолійович ГОЛОВАЦЬКИЙ, доктор фізико-математичних наук, професор, професор кафедри термоелектрики та медичної фізики Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича;

2. Степан Федорович ДЯЧУК, кандидат технічних наук, доцент, проректор з науково-педагогічної роботи Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя;
3. Павло Орестович МАРУЩАК, доктор технічних наук, професор, проректор з наукової роботи Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя;
4. Юлія Олександрівна СЕТІ, доктор фізико-математичних наук, професор, професор кафедри прикладної математики Національного університету "Львівська Політехніка";
5. Володимир Михайлович ТКАЧУК, доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри теоретичної фізики імені професора Івана Вакарчука Львівського національного університету імені Івана Франка;

З присутніх – 18 докторів наук та 21 кандидат наук і доктор філософії (фахівців за профілем поданої дисертації).

Голова засідання – доктор фізико-математичних наук, академік НАН України, головний науковий співробітник Ю.В. ГОЛОВАЧ.
Секретар засідання – кандидат фізико-математичних наук, наукова співробітниця О.А. ДОБУШ.

2. СЛУХАЛИ Доповідь доцента кафедри програмної інженерії Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя Ігоря Володимировича БОЙКА за матеріалами дисертаційної роботи “Теорія електронних процесів та взаємодії електронів з акустичними фононами у арсенідних та нітридних напівпровідникових наноструктурах”, поданої на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – “теоретична фізика”.

Тему дисертації затверджено 17 вересня 2024 року на засіданні вченої ради Інституту фізики конденсованих систем НАН України протокол №40.

Робота виконана в Тернопільському національному технічному університеті імені Івана Пулюя Міністерства освіти і науки України.

По доповіді було поставлено запитання, на які доповідач дав правильні та ґрунтовні відповіді:

Д. ф.-м. н., член-кор. НАН України, директор Інституту фізики конденсованих систем НАН України Т. М. БРИК:

1) Запитання щодо потенціальної схеми наноструктури в якій реалізуються двофотонні квантові переходи і повного рівняння Шредінгера: які спрощення чи припущення було зроблено для того, щоб отримати аналітичні розв’язки цього рівняння?

Відповідь: безпосередньо ніяких спрощень для відшукання розв’язків повного рівняння Шредінгера не робилось. З вигляду стаціонарного електронного гамільтоніана видно, що використовувалась модель ефективних мас електрона та прямокутних потенціальних бар’єрів при урахуванні того факту, що до наноструктури прикладено повздовжнє постійне електричне поле, що лінійно “зрізає” потенціальний профіль. Щодо хвильової функції, то такий її вигляд

зумовлений застосуванням теорії збурень при умові реалізації згаданих двофотонних переходів.

2) Чи можете повідомити, якими є розміри шарів, зокрема квантових ям досліджуваної наносистеми у нанометрах, чи скільки атомарних площин містить такий шар? Наскільки ефективна така модифікація електронного гамільтоніана?

Відповідь: в даному випадку квантові ями, чи довільні шари наносистеми в безпосередніх розрахунках мали розмір від 2 нм до 7 нм. Зокрема для наноструктур на основі арсеніду галію таке представлення електронного гамільтоніана працює дуже добре. Розрахунки на основі розвиненої теорії перевірялись з використанням параметрів експериментально реалізованого квантового каскадного лазера, про енергетичну електронну схему ми якраз і говоримо. Отримане відхилення у точності розрахунків електронних енергій складає не більше 2-3%.

3) Чи поводять себе електронні рівні таким чином, що вони залежать від перекривання хвильових функцій від атомів на сусідніх атомарних площинах з формуванням відповідних зон? Чи можна у такому підході уважати, що, наприклад, ми маємо шар із шести атомарних площин, то мало би бути шість електронних рівнів?

Відповідь: оскільки в даному випадку ми маємо квазістаціонарні електронні стани то таким чином описувати їх не цілком доцільно, оскільки такі рівні локалізуються у певній квантовій ямі, причому ймовірність такої локалізації ненульова для кожної із потенціальних ям і всередині всієї наноструктури.

Д.ф.-м.н., старший науковий співробітник А. С. ВДОВИЧ:

Чому на рисунку є дві частоти Ω_{21} і Ω_{32}? Чи не достатньо просто Ω_{21}? Чи там не буде в такому випадку інверсної заселеності рівня?

Відповідь: така інверсна заселеність рівня пов’язана цілком з функціональною особливістю таких наноструктур. В нашому випаду інверсна заселеність буде мати місце саме для того рівня, на який падають електрони вхідного пучка, а це третій електронний рівень наносистеми. Відповідно електронні переходи й починаються з цього третього електронного рівня. Якщо ми будемо мати інверсну заселеність першого рівня, то ми вже маємо говорити про детектор. Хоча хотів би зауважити, що в такій постановці задачі я не виключаю можливості детекторних переходів. В нас загалом тут цікавила лазерна генерація – випромінювання електромагнітного поля.

Д.ф.-м.н., провідний науковий співробітник А. М. ШВАЙКА:

1) Ви згадували, що для таких відкритих квантових наноструктур присутні паразитарні струми, які звичайно, треба у той чи інший спосіб усувати. Тобто чи проводили ви якийсь аналіз, чи оптимізацію параметрів того, як параметри наноструктури впливають на величини паразитарних струмів з тим, щоб їх максимально усунути?

Відповідь: ці згадані величини паразитарних струмів, що виникають у одно- та двофотонних переходах відповідають аналогічним величинам електронної провідності. Ми їх розраховуємо для кожної геометричної конфігурації наносистеми, які було показано на рисунках. Зокрема величини провідності із позначкою "-" і відповідають цим паразитарним струмам.

2) Чи проводили ви оптимізацію параметрів наноструктури з метою мінімізації цих паразитарних струмів?

Відповідь: так, така оптимізація здійснювалась шляхом зміни геометричного дизайну наноструктури, такі конфігурації з мінімальним значенням паразитарного струму подано на розрахованих залежностях електронної провідності. Зокрема, як видно, така оптимальна конфігурація вникає при значенні величини потенціальної ми від 2 нм до 4 нм.

Д.ф.-м.н., професор В. М. ТКАЧУК:

1) В мене запитання стосовно електронного гамільтоніана та потенціальної ями досліджуваних наноструктур. Оці скошені лінії, що відповідають потенціальним ямам та бар'єрам наносистем, вони є результатом прикладеного електричного поля? Чи є це в такому випадку діелектрична структура, бо в провідній структурі такого ефекту не було б?

Відповідь. Такі скошені лінії, що задають потенціальну схему наноструктури є результатом впливу постійного зовнішнього електричного поля, яке використовується для того, щоб ми могли коригувати потік електронів. Сама ж наноструктура є напівпровідниковою.

2) Тобто ця наноструктура провідна? Адже в такій структурі не виникає такого ефекту із скошеним потенціалом через перерозподіл електронів потенціальні бар'єри та ями вирівнюються.

Відповідність: так, наноструктура провідна, але оскільки вона напівпровідникова, то в даному випадку ми маємо на увазі саме її електронну провідність – те як електронний потік проходить через неї. Ефект скошеності потенціалу за рахунок електричного поля тут формується за тим же принципом, як і в діелектрику.

Д.ф.-м.н., провідний науковий співробітник А. М. ШВАЙКА:

1) Моє запитання стосується як запропонованого перерозподілу заряду, так і в принципі до самої моделі, яку ви використовуєте. А саме: потенціальні бар'єри, вони є заряджені, чи вони є електронейтральними?

Відповідь: так, наноструктура є електронейтральною, її шари не є зарядженими не залежно від того чи це потенціальна яма, чи бар'єр, тут в якості заряду виступає електронна хмарина, що розподілена по всій області наносистеми, оскільки електрон тунелює через наносистему за скінченний час.

2) В принципі у вас є перерозподіл електронів між бар'єром і ямою, з електронейтральності випливало б, що є електронна рідина і є фон, що створений іонами бар'єрів. Відповідно, коли

електрони виходять з бар'єрів, то залишається нескомпенсований заряд іонної підсистеми. Це є основою появи так званих подвійних шарів на межі різних середовищ. А саме коли електрони виходять і середовища, то там виникає додатно заряджений шар. Тобто на границі розділу середовищ мав би з'являтися подвійний шар. У вас у постановці немає позитивного заряду іонної гратки?

Відповідь: в даному випадку такого ефекту немає, оскільки ми розглядаємо тільки електронну задачу, проте суміжний випадок розглядається у дисертації. А саме випадок, коли ми маємо легування, але не бар'єрів, а саме квантових ям. Такий ефект більш виражений для нітридних наноструктур, і це буде впливати на розв'язки рівнянь Шредінгера та Пуассона. Щодо заряду на гетеромежах наносистеми, то тут його виникнення має дещо іншу природу – ці заряди є наслідком різних значень величини сумарної поляризації окремого шару наносистеми.

Д.ф.-м.н., старший науковий співробітник А. С. ВДОВИЧ:

В поданій розрахованій запропонованим вами методом потенціальній схемі нітридної наноструктури електрон у першому стаціонарному стані (червона лінія) знаходиться у першій квантовій ямі, у другому стаціонарному стані (зелена лінія) знаходиться у другій квантовій ямі. А чому він знаходиться у другі квантовій ямі? Як на мене, то він мав би знаходитися частково у першій, частково у другій ямі, частково третій ямі.

Відповідь. Так і є, на у кожному з своїх станів, електрон з відмінною від нуля ймовірністю знаходиться в кожній з потенціальних ям наносистеми. Це було більш добре видно, якщо будувати розподіл ймовірності знаходження електрона для кожного стану окремо. В даному випадку квадрати хвильових функцій кожного стаціонарного стану було приведено до шкали енергій, щоб продемонструвати їх разом із електронним спектром.

Д. ф.-м. н., член-кор. НАН України, директор Інституту фізики конденсованих систем НАН України Т. М. БРИК:

1) Так розумію, що при розрахунку потенціального профілю наносистеми, ви спочатку знаходите хвильові функції електрона в заданому потенціалі, потім знаходите з хвильових функцій густину просторового заряду, потім з рівняння Пуассона знову отримуєте потенціал, й в результаті у вас така самоузгоджена процедура?

Відповідь: так, процедура знаходження розв'язків системи рівнянь Шредінгера та Пуассона є самоузгодженою, і як можна бачити вона є збіжною.

2) Звідки ви отримуєте рівень Фермі?

Відповідь: рівень Фермі розраховувався з умови електронейтральності наносистеми.

Д.ф.-м.н., старший науковий співробітник О. В. ВЕЛИЧКО:

На мою думку, у вас мав би виходити закон дисперсії на зразок закону Фіваза, але я нічого схожого на це не побачив, хоча наносистема є сильно анізотропною і поєднує двовимірні та тривимірні риси.

Відповідь. В залежності задач, які розглядались у дисертації, а саме електронних чи фононних дійсно доводилось працювати у моделях двовимірних та тривимірних наносистем. Щодо аналогу закону Фіваза, то таке питання я поки не досліджував.

Д.ф.-м.н., Академік НАН України, провідний науковий співробітник Ю. В. ГОЛОВАЧ:

У вас наведено дев'ять різних графіків залежностей компонент поля зміщення для акустичних фононів. Чи ви спостерігали якусь тенденцію, чи отримали якийсь новий ефект, чи просто побачили, що графіки залежать від зміни параметрів? Можете зробити загальний якісний висновок?

Відповідь: всі залежності компонент є унікально різними для різних значень енергії акустичних фононів, і що важливо, вони будуть формувати різної величини деформаційний потенціал, що є визначальним фактором при дослідженні електрон-фононної взаємодії. Також це говорить про те, що ми маємо враховувати не одну фононну моду для якогось конкретно взятого значення хвильового вектора, а розглядати як для всього діапазону значень фононного спектру поводить себе деформаційний потенціал.

Д.ф.-м.н., старший науковий співробітник О. В. ВЕЛИЧКО:

Ви раніше в розповіді говорили про виникнення поляризації у досліджуваній наносистемі і у вас досліджуються фононні моди. Чи можуть вникати заморожені фононні моди, які би приводили до виникнення цієї поляризації? Чи такі випадки досліджувались?

Відповідь: так, якщо говорити про п'єзоелектричну поляризацію, то в загальному випадку нам слід враховувати теорію акустичних фононів разом з п'єзоелектричним ефектом. Такий підхід у дисертації дозволяє повністю описати обидва механізми взаємодії електронів з акустичними фононами: через деформаційний та через п'єзоелектричний потенціали. Особливо це стосується наносистем з великою кількістю шарів, що є найбільш близькими до експериментально реалізованих конфігурацій. По суті, за хронологією своєї наукової діяльності я спочатку вирішував класичну задачу із розробки теорії акустичних фононів, а тоді вже ускладнював таку проблему.

Д. ф.-м. н., академік НАН України, головний науковий співробітник І. М. МРИГЛОД:

Вами було повідомлено, що є п'ять груп фононних мод. Чим, взагалі кажучи, визначається число цих груп, коли ми виходимо із загального рівняння поширення хвиль у суцільному середовищі?

Відповідь: кількість груп фононних мод визначається компонентним складом напівпровідника. В даному випадку ми маємо дво- і трикомпонентні напівпровідники. В результаті кожна межа між групою фононних мод визначається послідовно за зростанням значень енергіями поперечних фононів у масивному кристалі, а тоді аналогічно енергіями повздовжніх фононів у масивному кристалі. Відповідно для двокомпонентного виду наноструктури ми мали б тільки чотири групи фононів.

Д. ф.-м. н., член-кор. НАН України, директор Інституту фізики конденсованих систем НАН України Т. М. БРИК:

Вами було продемонстровано багато аналітичних результатів, результатів числових розрахунків, графічних залежностей. Чи є якісь порівняння з експериментальними результатами по нейтронному розсіянню, де були виконано спроби отримати фононні частоти? Чи є взагалі порівняння з експериментальними результатами.

Відповідь: звичайно так. Саме перше це те, що вдалось прийти до розуміння того, що процеси слід описувати у моделях відкритих наносистем. Це видно із перших слайдів, на яких було продемонстровано як виглядають ці наноструктури. У випадку теорії двофотонної генерації через кілька років після публікацій мала місце експериментальна реалізація такого механізму лазерної генерації. Щодо спектру акустичних фононів, то звертаю увагу на графік де цей спектр безпосередньо порівнювався з експериментом у випадку наявності п’єзоелектричного ефекту, там власне було хороше узгодження результатів. У випадку коли розглядалась електрон-фононна взаємодія, температурне перенормування смуги поглинання розраховувалось для параметрів експериментально реалізованого квантового каскадного детектора, результати безпосередньо порівнювались.

Д.ф.-м.н., старший науковий співробітник А. С. ВДОВИЧ:

1) Запитання по спектру акустичних фононів при наявності п’єзоелектричного ефекту. При рівному нулю хвильовому векторі у вас наявна ненульова частота. Що це за коливання? Чи це коливання одних шарів наносистеми відносно інших?

Відповідь: дані коливання відбуваються по відношенню до зовнішнього середовища. При хвильовому векторі, що прямує до нуля, матимемо так звані напівобмежені акустичні фонони. Вони з’являються як результат коливання середовища наноструктури по відношенню до континууму зліва та справа від неї.

2) А чи розглядали коливання одних шарів відносно інших? Скажімо коливання шару арсеніду галію відносно шару алюмінію нітриду?

Відповідь: так, такі коливання можливі, але в цьому випадку ми будемо мати справу з оптичними модами. Це треба рухатись у вищі значення енергій фононного спектру.

Д.ф.-м.н., провідний науковий співробітник Я. Й. ЩУР:

1) При порівнянні з експериментом розрахованої смуги поглинання ви приводите числа Ω_{12}, Ω_{13}, Ω_{14}. Що вони означають?

Відповідь: це значення енергій електронних детектувальних переходів з першого електронного рівня на другий, третій та четвертий рівні, перенормовані взаємодією з акустичними фононами при різних значеннях температури.

2) Чи оцінювали ви десь енергії акустичних фононів для цього випадку?

Відповідь: значення енергій акустичних фононів при наявності п'єзоелектричного ефекту для даної наноструктури подано на окремому рисунку. Як видно вони лежать у діапазоні від 5 меВ до 30 меВ. Далі знаходиться спектр оптичних фононів.

3) Якщо ми маємо об'ємний кристал, то в ньому є три акустичні гілки. Ми починаємо зменшувати цей континуум, переходячи до якоїсь наноструктури. Чи є якась кореляція між тими акустичними фононами вашої періодичної наноструктури і інших наноструктур?

Відповідь: коли ми маємо періодичну наноструктуру, то при зменшенні її розміру слід слідкувати за чотирма вітками, які відповідають масивним кристалам. Тобто якщо ми будемо якимось чином зменшувати внесок від гетеромеж, то ці всі вітки будуть по-суті зливатися до цих віток для масивних кристалів. Але загалом така дисперсія спектра пов'язана насамперед із гетеромежами. Тому, щоб відповісти на поставлене питаннями, ми маємо якимсь чином зменшувати до нуля квантові ями досліджуваної наноструктури, тобто розглядати окремо бар'єр чи квантову яму. Загалом якщо порівнювати з об'ємним кристалом, то в такому випадку будуть просто згадані чотири вітки фононних залежностей.

Д.ф.-м.н., професор В. М. ТКАЧУК:

1) В мене є запитання до ваших вихідних положень, адже вони містять фундаментальні проблеми, які є у квантовій механіці, і одна з них, які я зауважив це гамільтоніан з масою залежною від координати. Тут є фундаментальна проблема про впорядкування оператора імпульсу і маси, що залежна від координати. Як я бачу, то ви вибрали одне із можливих упорядкувань. Якою була мотивація вибрати саме таке упорядкування, а не інше? Тобто яким чином ви розв'язуєте цю проблему упорядкування маси та оператора імпульсу?

Відповідь: мотивація вибору саме такого гамільтоніана значної мірою випливає з досвіду наукової роботи чернівецької школи теоретичної фізики за останні кілька десятиліть. Мені варто зіслатись на дисертацію доктора фізико-математичних наук, професора Володимира Анатолійовича ГОЛОВАЦЬКОГО, в якій було встановлено, що саме така модифікація для гамільтоніана найкраще працює для наноструктур. В такому підході така модифікація дає хороші результати із розрахунку спектрів квазічастинок у наносистемах, особливо на початковому етапі дослідження, коли слід насамперед розраховувати стаціонарний спектр.

2) Яке ще інше впорядкування ви пробували, що воно порівняно з обраним погано працює?

Відповідь: на початкових етапах для порівняння бралась модифікація гамільтоніана в моделі Латтінжера. Вона добре працює в сферичних наносистемах, а щодо плоских наносистем, то відбувається суттєве завищення енергій на 15–20%. Можна звернути увагу, що ця модель є досить поширеною, але її використовують виключно дослідники сферичних наноструктур.

Д.ф.-м.н., професор В. А. ГОЛОВАЦЬКИЙ:

Запитання щодо шостого розділу де досліджувались електронні квазістаціонарні стани. Чи ви досліджували енергії вище потенціальних бар'єрів віднесені до неперервного спектру. Чи вони мають якісь особливості порівняно із квазістаціонарними станами.

Відповідь: ті енергетичні сани, що розміщені над потенціальними бар'єрами ми в принципі могли б досліджувати, там особливостей порівняно з квазістаціонарними станами немає, проте ці рівні не беруть участь у роботі реального наноприладу. Безпосередньо ми завжди приймаємо до уваги існування рівнів неперервного спектра, теорія розвинена в шостому розділі дозволяє описувати довільні електронні стани незалежно.

3. ВИСТУПИ ПРИСУТНІХ

З оцінкою дисертаційної роботи І. В. Бойка, доцента Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя, виступили рецензенти: д.ф.-м.н., провідний науковий співробітник **А. М. ШВАЙКА;** д. ф.-м.н., старший науковий співробітник **А. С. ВДОВИЧ,** д.ф.-м.н., старший науковий співробітник **О. В. ВЕЛИЧКО:**

1. Д.ф.-м.н., провідний науковий співробітник **А. М. ШВАЙКА**:
Справа полягає в тому, що в теоретичній фізиці є різні підходи до опису складних систем, оскільки треба враховувати всі нюанси структури, її хімічного складу, можна пробувати розв'язати задачу потужними числовими методами. А можна будувати прості теоретичні моделі з їх подальшим ускладненням, щоб далі просунутись в отриманні тих чи інших аналітичних результатів. Числовий метод має той недолік, що в результаті він дає виключно число і важко оцінити якійсь залежності, які дуже люблять отримувати скажімо експериментатори. Школа Миколи Васильовича Ткача вирізнялася завжди насамперед тим, що вони завжди на основі теоретичних моделей могли запропонувати експериментаторам прості співвідношення, які можна перевірити на експерименті. Тут ми маємо приклад якраз такого теоретичного дослідження, коли електронна підсистема описується у наближенні ефективної маси добре працює для напівпровідникових наносистем. Ця модель була в дисертації модифікована для урахування складніших ефектів пов'язаних як з п'єзоелектричним ефектом так із різного роду збудженнями додаткової фононної підсистеми, яка моделюється у межах суцільного середовища. Слід зауважити, що має місце врахування вже квазістаціонарних станів. Сама робота, вона виглядає дуже цілісною, в тому плані, що вона починається з розгляду простіших проблем, далі переходиться до складніших задач, і головне, є зв'язок між розділами дисертації. Ми маємо нормальну, гарну роботу, яка є добре опублікована, особливо за останні роки є публікації у Physical Review B та інших серйозних журналах. Робота є гарною і ми можемо рекомендувати її до захисту.

2. Д.ф.-м.н., старший науковий співробітник **А. С. ВДОВИЧ:**
Я б хотів сказати, що ці багатошарові резонансно-тунельні структури дозволяють залежно від ширини квантових ям регулювати спектр випромінювання квантових каскадних лазерів, а також, враховуючи п'єзоелектричний ефект, впливати стисканням на електронні енергії та спектр випромінювання. У зв'язку з цим дисертаційна робота І. В. БОЙКА є дуже актуальною. Я також підтримую, що дисертацію слід подавати у спеціалізовану вчену раду для її захисту.

3. Д.ф.-м.н., старший науковий співробітник **О. В. ВЕЛИЧКО:**
Я з певною хорошою заздрістю дивлюся на цю роботу, бо як казав Андрій Михайлович ШВАЙКА, зараз є модні числові методи, але я особисто більше люблю теоретичний підхід. Проте я більше звик застосовувати модельний підхід, коли використовуються певні моделі. А тут є чиста гарна теорія, записується рівняння Шредінгера, все чесно і ясно виписується, спокійно й послідовно подається у такому класичному стилі. Знову ж таки, ми маємо вкрай цілісну роботу в якій є єдиний підхід, є єдиний клас проблем. Ці проблеми розвиваються і вглиб, і ширше шляхом врахування нових ефектів, зокрема деформаційних. І це дуже добре, що вони є враховані, бо деформаційні ефекти дуже часто є ключовими; якщо їх не враховувати, то ми просто не будемо мати хороших якісних результатів. В роботі дуже гарно поєднано теорію з реальними системами, з реальними кристалами, реальними фізичними задачами. Тобто питання, навіщо ця теорія, тут ніколи не стоїть. За дисертацією є гарні публікації, її тема актуальна, робота справляє просто чудове враження і її автор впевнено доповідає. Як бачимо, автор може похвалитись таким об'ємом результатів, що ми вже другу годину їх обговорюємо. Ця робота достойна всіляких похвал. Єдине, щоб я хотів би порекомендувати, і, мабуть, автор це розгляне в наступних своїх робота, це те, що досліджувані наноструктури становлять своєрідний мікс між двовимірними і тривимірними системами, проявляючи анізотропію властивостей, при відсутності періодичності. Хочеться порадіти за те, що автор дисертації розглянув і значною мірою розв'язав усі ці задачі, усі ці проблеми. Я б хотів підтримати дану роботу і її рух до захисту докторської дисертації.

Загальна характеристика дисертаційної роботи рецензентів позитивна. Рецензенти запропонували рекомендувати дисертаційну роботу до подання та захисту у спеціалізованій вченій раді.

З оцінкою дисертаційної роботи виступили також присутні на фаховому семінарі.

Д.ф.-м.н., професор **В. М. ТКАЧУК:**
Перше, що хочу сказати, то ця дисертація є в руслі наукової школи Миколи Васильовича ТКАЧА. Його наукова школа розвивається, рухається вперед і це чудово. Робота містить величезну кількість результатів, вона є добре опублікована, тому без сумніву ця дисертаційна робота заслуговує, щоб її розглянути на предмет захисту. Я лише скажу ті слова, які вже говоряться на захисті, що автор дисертації заслуговує присвоєння йому наукового ступеня доктора наук, але надіюсь це сказати вже на самому захисті. Хочу побажати автору здоров'я і успіхів.

Д. ф.-м. н., академік НАН України, головний науковий співробітник **І. М. МРИГЛОД**:
Я приєднуюсь до думок своїх колег до загальної оцінки дисертації. Дійсно є великий обсяг матеріалу, я хочу побажати пану Ігорю пройти цей прикінцевий етап. За великою кількістю слайдів, формул та графіків стоїть великий об'єм роботи, виконаний автором. Гарно, що ефект лазерного підсилення, який було розраховано у першому розділі дисертації було виявлено експериментально. Загалом я дуже радий, що ми мали змогу послухати вкотре роботу з школи Миколи Васильовича ТКАЧА. Ця школа має свій стиль за останнє десятиліття, це власне такі от шаруваті системи, є ціла низка гарних результатів. Часто в нас доповідала докторантка Миколи Васильовича — Юлія Олександрівна СЕТІ. Я б рекомендував, щоб ця достойна дисертація була представлена на спеціалізованій вченій раді нашого інституту.

Д.ф.-м.н., професор **Ю. О. СЕТІ:**
Дорогі колеги! Я постараюсь коротко відмітити декілька основних моментів як про роботу так і про доповідача Ігоря Володимировича з яким я знайома особисто, і з яким ми інтенсивно працювали ще в Чернівецькому національному університеті імені Юрія Федьковича в його аспірантські роки. З того часу відбулось багато подій вже, після закінчення аспірантури він інтенсивно працював сам практично самостійно. Тут от хочу наголосити і відмітити, бо ця докторська наукова робота виконана без наукового консультанта. Можна уявити собі, скільки це праці, наполегливості, і навіть не те що захоплення, а любові до фізики має Ігор Володимирович для того, щоб проробити всю цю роботу. Дисертація має неймовірний об'єм і вона дійсно виконана в тому напрямку, який започаткував ще Микола Васильович. Ігор Володимирович тут доклав багато зусиль як для виконання аналітичних розрахунків, як потребуючих подальших чисельних розрахунків, це те на що він наголошував у доповіді безпосередньо. Щодо самого об'єкту та предмету дослідження, то оці шаруваті ізотропні та анізотропні структури, вони ж є складовими елементами дуже актуальних інфрачервоних лазерів та детекторів, які в наш час є приладами високого класу. Щодо теоретичних підходів, то я б хотіла дещо доповнити про модель ефективної маси, яка використовувалась як координатно-залежна функція. Діло в тому, що той гамільтоніан, який використовується в дисертації, він записаний у моделі Бен-Деліенл-Дьюка. Річ в тому, що адекватного та коректного запису оператора кінетичної енергії з залежною від координати ефективною масою, то це питання давно виникало й досліджувалось ще в 70-х і 80-х роках минулого століття. Воно актуалізувалось безпосередньо тоді, коли вже виникла потреба і можливість створення багатокомпонентних напівпровідникових шаруватих наноструктур. Це питання ми також вивчали, опублікували серію робіт де в різних підходах порівнюються результати того як і в якій формі слід записати оператор для кінетичної енергії. Також з'ясувалось, що саме розглядувана в дисертації модель є найбільш адекватною. Уважаю, що робота Ігоря Володимировича є абсолютно завершеною, щодо публікацій, то дійсно, за останні роки йому вдалося прорватися у серйозні високорейтингові журнали, з чим його вітаю і підтримую його дисертаційну роботу.

Д.ф.-м.н., Академік НАН України, провідний науковий співробітник **Ю. В. ГОЛОВАЧ:**
Мені було цікаво на цьому семінарі не зважаючи на велику кількість матеріалу, цікаво було власне від самого процесу. Ця тематика, про яку розповідав доповідач, не є такого типу, яку ми розв'язуємо. Велика кількість формул, графіків, але у відповідь на питання я завжди чув загальну фізичну відповідь, зокрема дискусія багато для нас прояснила нового у цій тематиці. У мене відчуття після цього семінару, що ми маємо справу із здібною людиною, з гарною

дисертаційною роботою. Я вас вітаю хоча й довгою, але гарною і послідовною доповіддю, також би хотів рекомендувати дисертацію Ігоря Володимировича до подачі у спеціалізовану вчену раду.

Виступаючі при обговоренні дали позитивну оцінку дисертаційній роботі, підтвердили актуальність вирішеного наукового завдання: теоретичного дослідження електронного транспорту, акустичних фононів, механізмів електрон-фононної взаємодії при різних температурних режимах у низьковимірних напівпровідникових наноструктурах. Представлена дисертаційна робота І. В. БОЙКА повністю відповідає кваліфікаційним вимогам, відповідає спеціальності 01.04.02 – “теоретична фізика” і може бути рекомендована для подання до розгляду та захисту у спеціалізованій вченій раді без додаткових виправлень. Присутні на засіданні обговорили проект висновку, підготовлений рецензентами: д. ф.-м. н., провідним науковим співробітником відділу квантової статистики А. М. ШВАЙКОЮ, д. ф.-м. н., старшим науковим співробітником відділу квантової статистики А. С. ВДОВИЧЕМ і д. ф.-м. н., старшим науковим співробітником відділу квантової статистики О.В. ВЕЛИЧКОМ.

4. ЗАСЛУХАВШИ ТА ОБГОВОРИВШИ ДОПОВІДЬ Ігоря Володимировича БОЙКА, а також за результатами попередньої експертизи дисертації, яка представлена на фаховому семінарі Інституту фізики конденсованих систем НАН України, прийнято такі наступні висновки щодо дисертаційної роботи “Теорія електронних процесів та взаємодії електронів з акустичними фононами у арсенідних та нітридних напівпровідникових наноструктурах”.

Висновок
про наукову новизну, теоретичне та практичне значення результатів дисертації “Теорія електронних процесів та взаємодії електронів з акустичними фононами у арсенідних та нітридних напівпровідникових наноструктурах” здобувача ступеня доктора фізико-математичних наук Ігоря Володимировича БОЙКА за спеціальністю 01.04.02 – “теоретична фізика”

4.1. Актуальність теми дисертації

Розвиток квантової механіки у 1920-х роках став основою для глибоких досліджень фізичних явищ, які були несумісні з класичними постулатами Ньютона. Важливими прикладами таких явищ є фотоелектричний ефект, ефект Джозефсона та тунелювання електронів у напівпровідниках і надпровідниках. Тунельний ефект, зокрема, є ключовим для розуміння багатьох процесів у квантових системах і сучасній електроніці, яка базується на нанорозмірних структурах різної симетрії, таких як квантові точки, дроти та резонансно-тунельні структури. Розвиток теорії низьковимірних систем можна розділити на три основні етапи:

- теоретичне передбачення та експериментальне підтвердження тунельного ефекту: Спочатку тунельний ефект був передбачений в роботах Хунда, Гамова та Борна, а в 1958 році експериментально підтверджений Лео Есакі. Це відкриття призвело до створення резонансно-тунельних діодів, які стали основою для генераторів і детекторів високочастотних сигналів. Дослідження наноструктур та напівпровідникових матеріалів
- з кінця 1970-х років дослідження в області фізики наноструктур зосереджувались на вивченні електронних явищ, спектрів фононів та взаємодії екситонів з фононами. Роботи теоретиків, таких як Дж. Т. Девріз та Ф. Пітерс, сприяли переходу від використання германієвих напівпровідників до матеріалів на основі арсеніду галію. Це дало поштовх до створення напівпровідникових лазерів. Розробка та експериментальна реалізація квантових каскадних лазерів (ККЛ)
- у 1970-х роках Р. Казарінов та Р. Суріс запропонували моделі лазерів на основі електронних переходів між квазістаціонарними рівнями. Ці моделі були успішно реалізовані Ж. Фейстом та Ф. Капассо завдяки використанню методу молекулярно-променевої епітаксії, що дозволило створювати багатошарові резонансно-тунельні структури з високою точністю. Ці етапи стали основою для подальшого розвитку теорії та практичного застосування в електроніці, відкриваючи нові можливості для розробки наноприладів та напівпровідникових лазерів.

Сучасний стан теорії електронного транспорту в резонансно-тунельних структурах (РТС) та пов'язаних фізичних явищ спрямований на оптимізацію функціонування квантових каскадних лазерів (ККЛ) та квантових каскадних детекторів (ККД). Основна увага зосереджена на вивченні факторів, які впливають на електронні потоки через каскади РТС, і встановленні умов, що забезпечують їх ефективну роботу. Важливим аспектом є те, що значна частина сучасних ККЛ та ККД, виготовлених на основі арсенідних напівпровідникових сполук, функціонує лише у вузькому діапазоні електромагнітних хвиль, здебільшого у терагерцовому діапазоні, і вимагає охолодження до кріогенних температур. Одним із експериментальних відкриттів стало виявлення можливості генерації додаткових гармонік у каскадах ККЛ під дією електричного поля. Однак, це явище ще не отримало достатнього теоретичного пояснення. Тому важливою є задача виявлення закономірностей генерації додаткової гармоніки залежно від геометричного дизайну ККЛ та впливу зовнішніх полів. Це дозволить оптимізувати робочі

характеристики наноприладів шляхом збільшення генерованого тунельного струму. У дисертаційній роботі ця проблема розв'язується через дослідження електронних спектрів квантових станів (КСС) та аналіз внеску генерованої гармоніки у сумарну величину активної динамічної провідності. Щоб розширити робочий діапазон ККЛ і ККД, експериментально перейшли до використання нітридів III групи як матеріалів для каскадів. До переваг цих матеріалів відносяться висока температурна стабільність, значна оптична активність та можливість широкого варіювання частотою через геометричні параметри активних зон наноприладів. Однак, цей перехід призвів до виникнення ряду теоретичних проблем.

Розрахунок потенціальних профілів РТС: процедура вимагає розв'язання системи рівнянь Шредінгера та Пуассона з урахуванням впливу статичних та динамічних зарядів, які формуються у наноструктурах, а також впливу акцепторних домішок і поляризацій (спонтанної та п'єзоелектричної) у широкому температурному діапазоні.

Теорія акустичних фононів у багатошарових РТС: вона є практично відсутньою, особливо для анізотропних нітридних напівпровідників. На сьогодні більшість робіт базується на спрощених моделях, які не можуть бути основою для подальшого розвитку теорії. Взаємодія електронів з акустичними фононами: відсутня послідовна теорія, яка описує взаємодію електронів з різними типами акустичних фононів через деформаційний та п'єзоелектричний потенціали, особливо для нітридів. Тунелювання електронів через РТС: відсутня теорія, що враховує вплив акустичних фононів на спектральні параметри квазістаціонарних станів і безпосередньо на тунельний струм та електронну провідність. Теорія екситонних спектрів та їх взаємодії з акустичними фононами: відсутня теорія, що дозволяє дослідити міжзонні електронно-діркові переходи за різних температур. Таким чином, розробка послідовної теорії акустичних фононів та їх взаємодії з квазічастинками у багатошарових РТС, а також вирішення задачі генерації додаткових гармонік у ККЛ є важливими для подальшого розвитку теоретичної фізики напівпровідникових наноструктур. Ці задачі вирішуються в дисертаційній роботі, що робить її актуальною і значущою.

4.2. Зв’язок теми дисертації з державними програмами, науковими напрямами інституту та відділу

Дисертаційну роботу виконано у Тернопільському національному технічному університеті імені Івана Пулюя. Результати, які викладено наукових працях, опублікованих на під час виконання досліджень, отримані в результаті виконання таких держбюджетних тем: “Квантова теорія електронного тунелювання крізь анізотропні резонансно-тунельні наноструктури” (№ держреєстрації 0117U001151), “Моделювання тепломасопереносу та адсорбції вуглеводнів в нанопористих цеолітних каталізаторах систем нейтралізації відпрацьованих газів” (№ держреєстрації 0116U004744), “Високопродуктивні суперкомп'ютерні технології ідентифікації нейро-біо- та нанопористих систем з когнітивними і зворотніми зв'язками ”(№ держреєстрації 0119U001324), “Методи та високопродуктивні технології математичного моделювання і функціональної ідентифікації складних багатокомпонентних систем і процесів (нанопористі і нанорозмірні структури, об’єкти безпечної енергетики, когнітивні системи)” (№ держреєстрації 0122U001979). Автор дисертації є представником наукової школи кафедри теоретичної фізики Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича, заснованої доктором фізико-математичних наук, професором Ткачем Миколою Васильовичем — її багаторічним завідувачем та науковим вчителем здобувача.

4.3. Особистий внесок здобувача в отриманні наукових результатів

У спільних публікаціях автору дисертації належить:

- безпосереднє формулювання ідей та постановок задач.
- визначення цілей та методів дослідження.
- повністю аналітичні та частково числові розрахунки.
- безпосереднє написання та підготовка праць до друку.

Безпосередньо подані у дисертації наукові результати узагальнювались та аналізувались дисертантом особисто, автор брав безпосередню участь в обговоренні усіх результатів, опублікованих у спільних дослідженнях.

4.4. Достовірність та обґрунтованість отриманих результатів та запропонованих автором рішень, висновків, рекомендацій

Отримані теоретичні результати дозволили повністю пояснити природу додаткових електронних переходів у двоколірному квантовому каскадному лазері, яка зумовлена двофотонними електронними переходами, що мало подальше експериментальне підтвердження. Розроблені автором дисертації аналітичні методи розрахунку потенціальних схем нітридних наносистем показали високу надійність та ефективність у застосуванні для наноструктур з довільною кількістю шарів, зокрема й для експериментально реалізованих. Розвинена теорія акустичних фононів виділяється своєю аналітичністю, гнучкістю та надійністю застосування до багатошарових наносистем. Застосування теорії акустичних фононів та ефективних і надійних методів (методу мацубарівських функцій Гріна, методу трансфер-матриці) дало змогу отримати перенормовані взаємодією з акустичними фононами електронні спектри, екситонні спектри та смуги поглинання, температурні залежності для яких знаходяться у хорошому узгодженні з результатами експерименту. Розроблені нові методи теоретичної фізики, зокрема варіаційні та метод квантово-механічних інваріантів ефективно застосовано до електрон-фононних систем і процесів розсіяння електронів відкритими наноструктурами, зокрема теоретично встановлено їх зв'язок із квантовою теорією розсіяння та методом S-матриці. Наукові положення, висновки та рекомендації, які сформульовані у дисертації, повністю було обґрунтовано теоретичним аналізом та прикладами безпосередніх розрахунків.

4.5. Ступінь новизни основних результатів дисертаційної роботи порівняно з відомими дослідженнями аналогічного характеру

Наукова новизна отриманих результатів полягає у: 1) розробці аналітичної теорії акустичних фононів та взаємодії електронів та екситонів із акустичними фононами за довільних значень температури та детальному з’ясуванні механізмів такої взаємодії; 2) розробці теоретичних підходів до опису тунельного транспорту електронів у змінному електромагнітному полі та постійних зовнішніх полях на основі побудованих методів відшукання розв’язків повного рівняння Шредінгера. За результатами дисертаційної роботи вперше:

- побудовано теорію електронної провідності багатошарових резонансно-тунельних структур (РТС), в яких реалізуються можливості генерації або детектування додаткових гармонік електромагнітного поля. Встановлено, що у випадку реалізації додаткового

переходу за частотою, яка вдвічі перевищує номінальну робочу частоту квантового каскадного лазера, підсилення електронної провідності в сумарній її величині становить до 37%. Також встановлено, що для двоколірного ККЛ при реалізації додаткової гармоніки з частотою, відмінною від робочої частоти нанопристрою, підсилення електронної провідності за рахунок двофотонної генерації становить до 38% від загальної її величини, а для детектувальних електронних переходів ця величина складає не менше 35%.

- побудовано квантову теорію електронних КСС та електронної провідності багатошарових РТС з урахування внесків просторових статичного та динамічного зарядів. Встановлено, що зі збільшенням концентрації електронів енергія лазерного випромінювання зменшується, а сумарна величина електронної провідності збільшується таким чином, що в ній зростає внесок парціальної складової провідності, визначеної потоком, напрямленим протилежно до виходу із наносистеми. Встановлено, що для значних концентрацій електронів n_0 зростає вплив дисипативних процесів, спричинених просторовим динамічним зарядом, а також має місце зростання майже на порядок величин часів життя електронних КСС.

- розвинено аналітичну теорію типів акустичних фононів, виникаючих у нітридних РТС. Окремо побудовано теорію акустичних фононів у нітридних РТС з урахуванням створюваного ними п'єзоелектричного ефекту та виконано теоретичні розрахунки п'єзоелектричного потенціалу виникаючого в такому випадку. Встановлено, що як у випадку поперечних акустичних фононів, так і у випадку згинових та розтягувальних акустичних фононів урахування створюваного ними п'єзоелектричного ефекту приводить до появи у спектральних залежностях фононів від хвильового вектора розщеплення спектру, яке спостерігається при малих значеннях цього хвильового вектора.

- розвинено аналітичну теорію взаємодії електронів з акустичними фононами у багатошарових нітридних РТС через механізми деформаційного та п'єзоелектричний потенціалу за довільних значень температури. Встановлено, що електрони не взаємодіють з поперечними акустичними фононами через деформаційний потенціал, а така взаємодія можлива лише через механізм п'єзоелектричного потенціалу, лише при урахуванні п'єзоелектричного ефекту створюваного цими фононами. Встановлено, що зростання температури спричиняє збільшення абсолютних зміщень енергетичних рівнів електронних станів та їх згасань, спричиняючи перенормування величини поглинутої чи випроміненої енергії та відповідної смуги поглинання. Встановлено, що теплові зміщення електронного спектру зумовлені взаємодією електронів з згиновими та розтягувальними акустичними фононами через деформаційний потенціал можуть мати довільний знак, тоді як у випадку взаємодії через п'єзоелектричний потенціал тільки додатній.

- розроблено варіаційний метод для повного рівняння Шредінгера для дослідження тунельного електронного транспорту за наявності парціальної складової гамільтоніана, що умовлена акустичними фононами. З використанням даного методу розвинено теорію електронних КСС, електронної провідності та тунельного струму для відкритих нітридних РТС з урахуванням внеску акустичних фононів. Показано, що вплив акустичних фононів полягає у зміщенні резонансних енергії електронних КСС в низькоенергетичну область, а резонансні ширини цих КСС збільшуються. Також показано, що для багато-

шарових РТС вплив акустичних фононів з ростом температури приводить до зменшення формованої величини тунельного струму та еквівалентної величини електронної провідності.

- розвинено теорію електронного тунельного транспорту у відкритій багатошаровій наноструктурі шляхом застосування методу Льюіса-Різенфілда до залежного від часу рівняння Шредінгера в кожній з квантових ям якої є можливою генерація електромагнітних хвиль з різними амплітудами. Встановлено, що при фіксованих значеннях амплітуд електричної складової електромагнітного поля для значень часу, що менші за час релаксації зменшується величина максимуму коефіцієнта прозорості, значення резонансної енергії залишається незмінним, значення резонансної ширини зменшується. Для значень часу близьких до часу релаксації та більших від нього у залежностях коефіцієнта прозорості з'являються осциляції які приводять до неможливості однозначного визначення спектральних характеристик квазістаціонарного стану і його фактичного руйнування.

- розвинено теорію тунельного транспорту електронів крізь відкриту багатошарову наносистему за умови наявності впливу постійного внутрішнього електричного поля, постійного магнітного поля спрямованого перпендикулярно до напрямку руху електронів й з урахуванням взаємодії тунельованих електронів із змінним електромагнітним полем. Для цього розглянуто повне рівняння Шредінгера з залежним від часу потенціалом. Розв'язки цього рівняння з отримано шляхом модифікації методу Льюіса-Різенфілда разом з представленням хвильової функції у вигляді характерному для теорії розсіювання. Використання граничних умов для хвильової функції та потоку її ймовірності на межах шарів наносистеми дозволило однозначно визначити електронну хвильову функцію та *S*-матрицю з полюсів якою визначався електронний квазістаціонарний спектр – резонансні енергії та ширини. Встановлено, що зі збільшенням величини індукції магнітного поля, значення енергій електронних рівнів також зростають, формуючи антикросінги між сусідніми енергетичними рівнями. Положення цих антикросінгів із наближенням величини моменту часу t до значення відповідному часу релаксації τ_{tel} зміщуються в шкалі значень індукції магнітного поля вліво, частина цих антикросінгів взагалі зникає при $t \geq \tau_{tel}$. Як результат це дозволяє застосовувати магнітне поле, для зміни енергії квантових переходів між електронними рівнями, а також змінювати ширини смуг поглинання та випромінювання в функціонуючих наноприладах.

- побудовано послідовну теорію взаємодії екситонів з поперечними, флексуральними та ділататіональними акустичними фононами багатошарових нітридних AlN/GaN РТС при довільних температурах. Встановлено, що взаємодія екситонів з акустичними фононами спричиняє перенормування екситонного спектру, зменшення енергій зв'язку, при цьому з ростом температури інтенсивність міжпідзонних електронно-діркових переходів зменшується.

4.6. Перелік наукових праць, які відображають основні результати дисертації

За матеріалами дисертації опубліковано 42 наукові праці, з них: 26 статей у фахових наукових виданнях та 16 тез конференцій.

СТАТТІ:

1) Ткач М. В., Сеті Ю. О., Бойко І. В., Гринишин Ю. Б.. Взаємодія електронів з обмеженими фононами у багатошаровій резонансно-тунельній структурі // Фіз. хім. тверд. тіла. - 2014. - Т. 15, № 1. - С. 20-28.

2) Boyko I. V., Grynyshyn Yu. B., Seti Ju. O., Tkach M. V. The influence of static and dynamic spatial charges on electronic active conductivity of three-barrier resonant tunneling structures // J. Phys. Stud. 2014. Vol. 18, No. 4. P. 4702-1 –4702-10.

3) Ткач М. В., Сеті Ю. О., Бойко І.В., Паньків М.В. Роль двофотонних електронних переходів у роботі квантових лазерів // Сенсор. електрон. мікросистем. технології., 2014. - Т. 111, № 4. - С. 9-17.

4) Сеті Ю. О., Бойко І. В., Паньків М. В. Теорія динамічної провідності трибар'єрної резонансно-тунельної структури з двофотонними лазерними переходами // Фіз. хім. тверд. тіла. 2015. - Т. 16, № 1. - С. 7-13.

5) Gryschuk A. M., Boiko I. V. Influence of dimensional static and dynamic charges on conduction in the active zone of a quantum cascade laser // Semicond. phys. quantum electron. optoelectron. 2015. Vol. 18, No. 2. P. 123-127.

6) Boyko I. V., Petryk M. R., Tsupryk H. B. Contribution of two-photon detector electronic transitions in the formation of dynamic conductivity of three-barrier resonant tunneling structures // J. Nano-Electron. Phys. 2015. Vol. 7 No. 4, P. 04078.

7) Boyko I.V. Role of Two-Photon Electronic Transitions in the Formation of Active Dynamic Conductivity in a Three-Barrier Resonance Tunneling Structure with an Applied DC Electric Field // Ukr. J. Phys. 2016. Vol. 61, No.1. P. 66-74.

8) Boyko I. V., Gryschuk A. M. The Spectrum of Transverse Acoustic Phonons in Planar Multilayer Semiconductor Nanostructures // J. Nano- Electron. Phys. 2016. Vol. 8 No. 4, P. 04001.

9) Бойко І. В., Грищук А. М. Вплив статичного та динамічного просторових зарядів на спектральні параметри та активну динамічну провідність резонансно-тунельних структур з постійним електричним полем // Фіз. хім. тверд. тіла. 2016. - Т. 17, № 1. - С. 21-30.

10) Boyko I. V., Tkach M. V., Seti Ju. O. Self-Consistent Calculation of Potential Profile of GaN/AlN Resonance Tunnelling Structures // Phys. Chem. Solid St. 2017. Vol. 18, No. 3. P. 288-296.

11) Boyko I. V., Petryk M. R. Influence of the Space Charge on Tunneling of Electrons and Their Conductivity by the Resonance Tunneling Structures in the Constant Electric Field // J. Nano-Electron. Phys. 2017. Vol. 9, No 3, P. 03030.

12) Boyko I. V. Anisotropic wurtzite resonance tunneling structures: stationary spectrum of electron and oscillator strengths of quantum transitions // J. Phys. Stud. 2018. Vol. 22, No 1. P. 1701.

13) Boyko I. V. Analytical method for calculation of the potential profiles of nitride-based resonance tunneling structures // Condens. Matter Phys. 2018. Vol. 21, No. 4, P. 43701.

14) Boyko I. V., Petryk M. R. Shear Acoustic Phonons in Multilayer Arsenide Semiconductor Nanostructures // J. Nano- Electron. Phys. 2019. Vol. 11, No 1. P.01019.

15) Boyko I.V., Petryk M.R., Fraissard J. Spectrum and normalized modes of acoustic phonons in multilayer nitride-based nanostructure // Eur. Phys. J. B. 2020. Vol. 93, No. 3. P. 57.

16) Boyko I.V., Petryk M.R., Fraissard J. Acoustic phonons in multilayer nitride-based AlN/GaN resonant tunneling structures // Nano Expres. 2020. Vol. 1 No 1. P. 010009.

17) Boyko I. V. and Petryk M. R. Electron scattering on acoustic phonons in plane semiconductor GaN/AlN nanostructures // Proc. SPIE 11369, Fourteenth International Conference on Correlation Optics, 1136915 (6 February 2020); ISSN 0277786X.

18) Boyko I. V., Petryk M. R. Interaction of electrons with acoustic phonons in AlN/GaN resonant tunnelling nanostructures at different temperatures // Condens. Matter Phys. 2020. Vol. 23, No. 3., P. 33708.

19) Boyko I. V., Petryk M. R. Electron-acoustic Phonon Interaction in AlAs/GaAlAs Resonance Tunneling Nanostructures // J. Nano- Electron. Phys. 2020. Vol. 12, No 6, P. 06030.

20) Boyko I. V., Petryk M. R., Fraissard J. Theory of the shear acoustic phonons spectrum and their interaction with electrons due to the piezoelectric potential in AlN/GaN nanostructures of plane symmetry // Low Temp. Phys. 2021. Vol. 47, No. 2. P. 159–172.

21) Boyko I., Petryk M., Fraissard J. Investigation of the electron-acoustic phonon interaction via the deformation and piezoelectric potentials in AlN/GaN resonant tunneling nanostructures // Superlattices Microstruct. 2021. Vol. 156, No. 8. P. 106928.

22) Boyko I., Petryk M. Tunneling transport in open nitride resonant tunneling structures taking into account the acoustic phonons: An variational approach // Physica B Condens. Matter. 2022. Vol. 636, No. 1. P. 413862.

23) Boyko I., Petryk M. and Mykhailyshyn R. Excitons in resonant tunnelling structures based on AlN/GaN/AlN/AlGaN/AlN nitride: spectral dependences and intensities of interband optical transitions // Ukr. J. Phys. Opt. 2022. Vol. 23, No. 3. P. 180–191.

24) Boyko I. Exciton-phonon interaction in planar nitride nanostructures: The case of acoustic phonons // Phys. Rev. B. 2023. Vol. 108, No. 7. P. 075403.

25) Boyko I., Petryk M., Lebovka N. Application of the Lewis-Riesenfeld quantum mechanical invariant method for description of electron tunneling transport in nitride multilayer quantum well nanostructures // Phys. Lett. A. 2023. Vol. 489, P. 129152.

26) Boyko I., Petryk M., Lebovka N. Tunnel transport problem for open multilayer nitride nanostructures with an applied constant magnetic field and time-dependent potential: An exact solution // Phys. Rev. B. 2024. Vol. 110, No. 4. P. 045438.

4.7. Апробація основних результатів дослідження на конференціях, симпозіумах, семінарах тощо

Результати наукових досліджень, які подано в дисертації доповідались у форму доповідей в таких науково-дослідних закладах та закладах вищої освіти: наукових семінарах Інституту фізики конденсованих систем НАН України; наукових семінарах кафедри теоретичної фізики та комп'ютерного моделювання Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича, на спільному науковому семінарі кафедри теоретичної фізики імені І.М. Ліфшиця та відділу теоретичної фізики Інституту радіофізики та електроніки імені О. Я. Усикова НАН України, загальноуніверситетському семінарі Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя, семінарі відділу теорії квантових процесів у наносистемах Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова Національної академії наук України. Крім того результати дисертаційного дослідження доповідались на таких міжнародних і всеукраїнських конференціях: VI Українська наукова конференція з фізики напівпровідників (Чернівці, Україна, 2013); 6-а Міжнародна науково-технічна конференція "Сенсорна електроніка та мікросистемні технології (Одеса, Україна, 2014); «Лашкарьовські читання - 2015» Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників (Київ, Україна, 2015); «Лашкарьовські читання - 2016» Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників (Київ, Україна, 2016); XIX Наукова конференція Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя (Тернопіль, Україна, 2016); XX Наукова конференція Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя (Тернопіль, Україна, 2017); 2018 IEEE 8th International Conference on Nanomaterials: Applications & Properties (NAP – 2018, Sumy, Ukraine); «Лашкарьовські читання - 2018» Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників (Київ, Україна, 2018); VIII Українська наукова конференція з фізики напівпровідників УНКФН–8 (Ужгород, Україна, 2018); 2019 9th International Conference on Advanced Computer Technologies ACIT'2019 (České Budějovice, Czech Republic, 2019); Fourteenth International Conference on Correlation Optics (Chernivtsi, Ukraine, 2019); 2019 XIth International Scientific and Practical Conference on Electronics and Information Technologies (ELIT) (Lviv, Ukraine, 2019); 7th International Conference "Nanotechnologies and Nanomaterials" NANO-2019 (Lviv, Ukraine, 2019); IEEE International Conference on "Nanomaterials: Applications & Properties" (NAP-2020) (Sumy, Ukraine, 2020); 2022 IEEE 41th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO) 2022 (Kyiv, Ukraine, 2022); IEEE International Conference on "Nanomaterials: Applications & Properties" (NAP-2022) (Kraków, Poland, 2022); 2023 13th International Conference on Advanced Computer Information Technologies ACIT'2023 (Wrocław, Poland, 2023).

4.8. Наукове значення використаного дослідження із зазначенням можливих наукових галузей та розділів в програмі навчальних курсів, де можуть бути застосовані отримані результати

Наукова цінність результатів дисертаційної роботи полягає у отриманні ряду теоретичних результатів у фізиці низьковимірних систем та квантовій теорії розсіяння шляхом розробки нових математичних методів теоретичної фізики. Запропоновано теорію електронного транспорту у багатошарових наносистемах з урахування двофотонної генерації електромагнітного поля та просторового динамічного та статичного зарядів. Розвинено метод розрахунку потенціальних схем нітридних наноструктур. Запропоновано аналітичну теорію акустичних фононів у багатошарових наносистемах при урахуванні п’єзоелектричного ефекту. Розвинено теорію взаємодії електронів та екситонів з акустичними фононами та встановлено, що для нітридних наноструктур в значній мірі відіграють роль обидва механізми взаємодії: через деформаційний та п’єзоелектричний потенціали. Встановлено важливий результат, який полягає у ролі електрон-фононної взаємодії у температурному перенормування смуги поглинання. Запропоновано варіаційний метод, що дозволяє описувати тунельний транспорт та розсіювання електронів на нітридних наноструктурах з урахуванням фононної підсистеми при збереженні балістичного режиму тунелювання. Запропоновано метод відшукання квантово-механічних варіантів для відшукання розв’язків повного рівняння Шредінгера при тунелюванні електроні у нітридних наносистемах із залежними від часу потенціалами – багаточастотним електромагнітним полем та зовнішнім магнітним полем. Отримано важливі теоретичні результати, що вперше встановлюють зв'язок між представленням електронної хвильової функції у методі Льюіса–Різенфілда із її поданням згідно квантової теорії розсіяння та безпосереднім визначенням S-матриці розсіяння.

4.9. Практична цінність результатів дослідження із зазначенням конкретного підприємства, або галузі народного господарства, де вони можуть бути застосовані

Отримані результати та запропоновані методи теоретичної фізики можуть бути використаними для пояснення процесів електронного транспорту, електрон-фононної взаємодії та квантового розсіювання електронів плоскими наноструктурами при наявності постійних та залежних від часу зовнішніх полів.

4.10. Оцінка структури дисертації, її мови та стилю викладення

Дисертація має чітку та логічну структуру. Дисертаційна робота складається із вступу, семи розділів, основних положень дисертації, списку використаних джерел та одного додатку. Дисертаційна робота написана з дотриманням граматичних та дидактичних норм фахової української мови. Аспекти науково термінології дотримано повністю. Стиль та мова дисертації не викликають суттєвих зауважень.

Дисертаційна робота за структурою, мовою та стилем викладення відповідає вимогам Міністерства освіти і науки України.

У ході обговорення дисертації до здобувача не було висунуто жодних зауважень щодо суті самої роботи.

4.11. Відповідність дисертації паспорту спеціальності, за якою вона представлена до захисту

Дисертація є самостійною науково-дослідною роботою. Робота є актуальною і виконана на високому науковому рівні. Автор має відповідну ґрунтовну теоретичну підготовку й необхідні професійні знання. Робота відповідає спеціальності 01.04.02 – "теоретична фізика".

5. З урахування вище зазначеного, на фаховому семінарі зі спеціальності 104 – "Фізика і астрономія" Інституту фізики конденсованих систем НАН України ухвалили:

5. 1. Дисертаційна робота Ігоря Володимировича БОЙКА на тему "Теорія електронних процесів та взаємодії електронів з акустичними фононами у арсенідних та нітридних напівпровідникових наноструктурах" є завершеною науковою працею, у якій розв'язані актуальні наукові завдання: 1) виконано аналіз впливу двофотонних процесів та просторового динамічного заряду на процеси електронного тунелювання та генерації електромагнітного поля в плоских наноструктурах, 2) розвинено та успішно імплементовано аналітичний метод розрахунку потенціальних профілів нітридних наноструктур, 3) розвинено послідовну аналітичну теорію акустичних фононів виникаючих у багатошарових наноструктурах в тому числі і за наявності п'єзоелектричного ефекту, 4) розвинено теорію взаємодії електронів та екситонів з акустичними фононами при довільних значеннях температури, встановлено й проаналізовано механізми такої взаємодії, 5) розвинено підходи, засновані на модифікації методу Льюїса–Різенфілда та варіаційному методі для повного рівняння Шредінгера, описуючого електрон-фононну систему, обґрунтовано їх використання до суміжних задач теорії розсіювання, електронного транспорту та спектральних задач із залежними від часу потенціалами. Дані отримані результати відповідають спеціальності 01.04.02 – "теоретична фізика" та мають важливе значення для галузі 10 – "природничі науки".

5. 2. Матеріали дисертації І. В. Бойка повністю висвітлено у 42 наукових публікаціях, з них 22 статті та 6 тез доповідей на наукових конференціях включено до міжнародних наукометричних баз.

5. 3. Дисертація І. В. Бойка за своїм змістом та викладом результатів відповідає вимогам постанови КМУ від 17 листопада 2021 р. № 1197 про Порядок присудження та позбавлення наукового ступеня доктора наук, наказів МОН України від 23 вересня 2019 року № 1220 «Про опублікування результатів дисертацій на здобуття наукових ступенів доктора і кандидата наук» та № 40 від 12.01.2017 р. "Про затвердження вимог до оформлення дисертації".

5. 4. З урахуванням високого наукового та фахового рівня І. В. Бойка, його дисертаційна робота "Теорія електронних процесів та взаємодії електронів з акустичними фононами у арсенідних та нітридних напівпровідникових наноструктурах" є завершеним науковим дослідженням і рекомендується для подання до розгляду та захисту на спеціалізованій вченій раді.

Головуючий на засіданні фахового семінару,
доктор фізико-математичних наук,
академік НАН України — Ю. В. ГОЛОВАЧ

Рецензенти:
доктор фізико-математичних наук,
провідний науковий співробітник — А. М. ШВАЙКА

доктор фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник — А. С. ВДОВИЧ

доктор фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник — О. В. ВЕЛИЧКО