

ЗАТВЕРДЖУЮ



Проректор з наукової роботи

Національного університету

"Львівська політехніка"

доктор технічних наук, професор

Іван ДЕМИДОВ

27" 2023 р.

ВИСНОВОК

про наукову новизну, теоретичне та практичне значення результатів
дисертаційної роботи докторанта кафедри загальної фізики
Національного університету "Львівська політехніка"

Кашуби Андрія Івановича

**«Трансформація електронного та фононного енергетичного
спектру в тонкоплівкових матеріалах групи $A^{IV}B^{VI}$ »,**

представлена на здобуття наукового ступеня

доктора фізико-математичних наук

за спеціальністю 01.04.18 – фізика і хімія поверхні

Призначенні рішенням Вченої ради Національного університету
"Львівська політехніка" від 31 жовтня 2023 року, протокол № 5, рецензенти,
а саме:

– Зачек Ігор Романович – професор кафедри загальної фізики,
професор, доктор фізико-математичних наук;

– Товстюк Наталія Корніївна – професор кафедри загальної фізики,
старший науковий співробітник, доктор фізико-математичних наук;

– Коломієць Олександр Вікторович – доцент кафедри загальної фізики, доцент, доктор фізико-математичних наук, розглянувши докторську дисертацію Кашуби Андрія Івановича «Трансформація електронного та фононного енергетичного спектру в тонкоплівкових матеріалах групи A^IVB^VI » (тема дисертації затверджена ухвалою Вченої ради Національного університету "Львівська політехніка" від 25.10.2022 р., протокол № 87 та уточнена 12.09.2023 р., протокол № 4; у період з 14.09.2022 до 13.09.2023 р. здобувач навчається на денній державній формі навчання у докторантурі Національного університету "Львівська політехніка" за спеціальністю 105 – прикладна фізика та наноматеріали), наукові публікації, в яких висвітлені основні отримані наукові результати, а також за результатами фахового семінару кафедри загальної фізики Національного університету "Львівська політехніка" від 2 листопада 2023 року, протокол № 1, **ухвалили:**

дисертаційна робота **Кашуби Андрія Івановича**, представлена на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.18 – фізика і хімія поверхні, є кваліфікаційною науковою працею, підготовленою у вигляді рукопису.

Актуальність теми дослідження

Враховуючи останні тенденції в сучасній електроніці, можна свідчити, що полікристалічні шари напівпровідників стають все більш цікавими для застосування в порівнянні з об'ємними напівпровідниками. На відміну від монокристалів, синтез полікристалічних (як об'ємних, так і шаруватих) напівпровідників характеризується більш простим і ефективним процесом виробництва, який не вимагає ні високоточного обладнання для вирощування, ні дорогих монокристалічних підкладок. Ці фактори роблять

напівпровідникові матеріали та пристрої на основі полікристалічних шарів або тонких плівок менш дорогими. Зокрема, полікристалічні шари представляють великий інтерес для розробників недорогих сонячних елементів для наземного застосування. Широке використання полікристалічних напівпровідників в електроніці тривалий час було обмежено наявністю численних протяжних дефектів, таких як межі зерен або дислокації. Однак, поточний прогрес у розробці цих матеріалів призвів до ситуації, коли полікристалічність матеріалів є радше надією на майбутнє, ніж проблемою. Як приклад, межі зерен у таких напівпровідниках виявляють специфічні електричні та рекомбінаційні характеристики, які можна використовувати в низці пристроїв. Ці межі зерен відіграють роль ефективного внутрішнього гетера, що сприяє видаленню залишкових домішок і точкових дефектів з об'єму матеріалу. Ця властивість міжзернових границь може бути використана для покращення експлуатаційних характеристик відповідних напівпровідникових електронних пристроїв і, зокрема, їх термічної та радіаційної стійкості.

Тонкі плівки халькогенідів кадмію представляють велику групу $A^{II}B^{VI}$ кристалічних матеріалів, які демонструють канонічну напівпровідникову поведінку. Ці матеріали охоплюють велику та важливу область досліджень через їх широкий потенціал застосування в різних областях оптоелектронних пристроїв. Напівпровідниковий матеріал CdTe є одним з провідних сполук для виробництва економічно ефективних фотоелектричних пристроїв другого покоління. Сонячні елементи на основі CdTe привертають значну увагу дослідників, оскільки CdTe характеризується прямою забороненою зоною з енергетичною смугою пропускання ~ 1.46 eV і високим поглинанням (понад 10^5 cm^{-1}). Це робить його чудовим світлопоглинаючим шаром для сонячних елементів. При формуванні високоефективних гетеропереходів на основі *p*-

CdTe переважно використовується сульфід кадмію (CdS), як оптичне «вікно» для сонячних батарей. CdS характеризується високим поглинанням і високою фотопровідністю у видимій області. Це пов'язано з тим, що CdS є прямозонним напівпровідником і, відповідно, характеризується прямими міжзонними оптичними переходами. Його ширина забороненої зони при кімнатній температурі становить ~ 2.42 eV. Електричні властивості CdS характеризуються питомим опором близько 10^6 Ом см і *n*-типом провідності. CdS кристалізується в кубічній та гексагональній фазі, залежно від вибору методу його синтезу та конкретних параметрів росту. У сонячних елементах на основі гетеропереходів CdTe/CdS товщина шару CdS в більшості випадків становить близько 150–300 нм. Тоді фотогенеровані носії заряду майже повністю рекомбінують всередині плівки CdS і не генерують фотострум. Завдяки високому поглинанню світла півками CdS в структурі не виникає фотоструму. Тому для виготовлення високоефективних сонячних елементів на основі CdTe бажано використовувати півки CdS товщиною менше 100 нм. Також, на виникнення фотоструму негативно впливає неузгодженість ґраток між шарами CdTe і CdS. Незважаючи на утворення твердих розчинів $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ ($\text{CdTe}_x\text{S}_{1-x}$) між шарами CdTe та CdS, які зменшують невідповідність ґратки, висока щільність дефектів спричиняє втрату ефективності. Використання CdSe може бути альтернативним вирішенням проблем, що виникають в з'єднанні CdTe/CdS. Тому в останні роки твердий розчин $\text{CdTe}_{1-x}\text{Se}_x$ є одним із перспективних матеріалів для вдосконалення сонячних елементів. Тонкі півки $\text{CdTe}_{1-x}\text{Se}_x$ потрібного складу можна синтезувати різними методами (випаровуванням у високому вакуумі певних елементів, або твердого розчину на їх основі; спільним випаровуванням CdTe та CdSe; сублімацією в замкненому просторі; осадження методом гарячої стінки; молекулярно-променевою епітаксією; електроосадження та іншими

методами). $\text{CdTe}_{1-x}\text{Se}_x$ кристалізується в кубічну (цинкова обманка) і гексагональну (вюрцит) структури, в основному залежно від вибору методу його синтезу та конкретних параметрів росту. Але для застосування в якості активного шару сонячного елемента бажана лише кубічна структура $\text{CdTe}_{1-x}\text{Se}_x$, оскільки вона є фотоактивною та може перетворювати світло у фотострум, тоді як гексагональна структура не є фотоактивною.

Незважаючи на значний обсяг наукових публікацій у цій галузі, зокрема щодо досліджень монокристалічних бінарних сполук групи $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$, зазначена проблема синтезу тонких плівок твердих розчинів на основі заявлених матеріалів та пошук більш ефективних структур для оптоелектронних систем (насамперед для сонячної енергетики) потребує додаткового вивчення. Тому встановлення загальних закономірностей та особливостей впливу методів синтезу на структурні, морфологічні, оптичні, електронні та сенсорні властивості тонких плівок твердих розчинів на основі сполук групи $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$, для підвищення ефективності оптоелектронних пристроїв на їх основі, є актуальним напрямом функціонального матеріалознавства.

Наукова новизна результатів дослідження

Наукові результати, що одержані А.І. Кашубою і виносяться на захист, є достатньо обґрунтованими. Вони полягають у встановленні основних фізико-технологічних параметрів осадження тонких плівок сполук групи $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$ та систематичному дослідженні їх структурних, морфологічних, оптичних, енергетичних та фононних властивостей.

Ознайомлення зі змістом дисертації та реферату, основними опублікованими працями дозволяє зробити висновок, що основні положення, які визначають наукову новизну дисертації і є предметом захисту, одержані

А.І. Кашубою як результат оригінального наукового дослідження. У ньому наукові положення, висновки й рекомендації сформульовані автором самостійно та добре відображають його особистий внесок.

У результаті проведених комплексних досліджень структурно-морфологічних, оптичних, електронних та фононних властивостей тонких плівок матеріалів групи $A^{II}B^{VI}$ та твердих розчинів заміщення (ТРЗ) на їх основі у дисертації **вперше**:

1. Для тонких плівок $CdTe_{1-x}Se_x$ осаджених методом ВЧ магнетронного напилення визначено енергію одиночного осцилятора (E_0), енергія дисперсії (E_d), показник заломлення n_0 , моменти M_{-1} та M_{-3} оптичних спектрів, силу осцилятора (f) та відношення щільності носіїв до ефективної маси (N_c/m^*).

2. Проведено аналіз спектральної поведінки оптичних функцій та встановлено відношення густини носія до ефективної маси носія (N_c/m^*) для тонких плівок $CdTe_{1-x}Se_x$. На прикладі тонких плівок $CdSe$ виявлено, що збільшення товщини призводить до зменшення відношення густини носія до його ефективної маси. Для тонких плівок $CdTe_{1-x}Se_x$ кристалізованих в структурі вюртцит виявлено на порядок менше значення (N_c/m^*) в порівнянні з $CdTe$. Показано, що в тонкій плівці $CdTe_{1-x}Se_x$ ($x=0.25$) кристалізованій в кубічній структурі відношення (N_c/m^*) зростає в порівнянні з $CdTe$.

3. Проведено визначення компонентів стріли прогину для ТРЗ $CdSe_{1-x}S_x$. Виявлено, що найменший вклад в стрілу прогину вносить компонента, яка пов'язана з прогином в результаті ефекту об'ємної деформації (δ_{VD}). Натомість для тонких плівок з вмістом сірки $x < 0.5$ визначальний вклад в стрілу прогину вносить коефіцієнт прогину, який описує зміну ширини забороненої зони при релаксації позицій іонів в ґратці твердого розчину (δ_{SR}). Проте, в тонких плівках з вмістом сірки $x > 0.5$ –

прогин пов'язаний з перерозподілом заряду між різними зв'язками в нерегульованому твердому розчині.

4. Проведено аналіз оптичних діелектричних функцій тонкої плівки ZnO:Al з використанням моделі вільних електронів Друде та встановлено кінетичні параметри (час релаксації, оптична рухливість та оптичний опір). Виявлено, що легування тонких плівок оксиду цинку алюмінієм призводить до збільшення оптичної рухливості, часу релаксації та частоти плазми.

5. Визначено енергію Урбаха для плівок ZnO:Al. Виявлено зростання енергії Урбаха в порівнянні із нелегованими плікам ZnO, що може бути спричинено збільшенням енергетичної ширини локалізованих електронних енергетичних станів тонких плівок внаслідок збільшення атомного розладу.

6. Проведено комплексні теоретичні розрахунки електронного та фононного енергетичного спектру матеріалів групи $A^{II}B^{VI}$ за нормальних умов та при дії гідростатичного тиску. Розраховано потенціал об'ємної деформації, похідні тиску першого та другого порядку для прямозонних і непрямозонних переходів та динаміку їх зміни в матеріалах.

7. Виявлено лінійне зменшення забороненої зони зі збільшенням гідростатичного тиску вище 30 ГПа для CdTe, що може бути пов'язана з металізацією зразка за надвисоких тисків.

8. Проведено комплексні дослідження трансформації електронних, оптичних, механічних та термодинамічних параметрів ТРЗ $CdTe_{1-x}Se_x$ та $CdSe_{1-x}S_x$. Встановлено їх концентраційні властивості та зміну основних параметрів при переході від монокристалічного зразка до тонкої плівки.

9. Проведено моделювання взаємодії поверхні тонкої плівки ТРЗ $CdSe_{1-x}S_x$ з молекулами CO, H₂ та NO₂. Встановлено основні енергетичні параметри і трансформацію оптичних властивостей при взаємодії тонкої плівки з вказаними молекулами.

Зміст дисертації, її завершеність та оформлення

Подана до попереднього захисту робота є самостійною, комплексною, логічно побудованою та завершеною науковою працею, яка відповідає вимогам стосовно змісту й оформлення, визначеним нормативними документами Міністерства освіти і науки України. Зміст дисертації відповідає спеціальності 01.04.18 – фізика і хімія поверхні. Основним результатом наукового дослідження А.І. Кашуби є розробка фізичних основ осадження тонких плівок твердих розчинів заміщення сполук групи $A^{II}B^{VI}$ і з'ясування закономірностей трансформації їх оптичних, електронних, фононних та сенсорних властивостей.

Дисертація складається з анотації, вступу, 6 розділів, висновків, списку використаних джерел, має логічну структуру, яка визначається метою та етапами вирішення поставлених завдань. Дисертація написана грамотною українською мовою, за структурою, мовою та стилем викладення матеріалу відповідає вимогам МОН України.

У першому розділі «Відпрацювання оптимальних режимів осадження тонких напівпровідникових плівок бінарних сполук $A^{II}B^{VI}$ і ТРЗ на їх основі» автором розглянуто фізико-хімічні основи технології осадження напівпровідникових плівок групи $A^{II}B^{VI}$ і ТРЗ на їх основі методами квазізамкненого об'єму, високочастотного магнетронного осадження та хімічного поверхневого осадження. Водночас запропоновано модифікацію методу квазізамкненого об'єму для осадження ТРЗ сполук $A^{II}B^{VI}$ з градієнтним розподілом компонент.

Другий розділ «Структура і морфологія поверхні тонких плівок бінарних сполук $A^{II}B^{VI}$ та ТРЗ на їх основі» присвячено структурному, морфологічному та компонентному аналізу осаджених тонких плівок різними методами, які описані в першому розділі.

У третьому розділі «Трансформація оптичних властивостей тонких плівок ТРЗ групи $A^{II}B^{VI}$ » досліджено поведінку основних оптичних властивостей синтезованих тонких плівок, проведено концентраційні залежності основних оптичних та енергетичних параметрів, встановлено оптимальні компонентні співвідношення для прикладного застосування досліджуваних сполук.

У четвертому розділі «Електронний та фононний енергетичний спектр сполук групи $A^{II}B^{VI}$ » приведено результати першопринципних розрахунків електронного та фононного енергетичного спектру для сполук групи $A^{II}B^{VI}$ кристалізованих в кубічній та гексагональній структурі, встановлено вплив гідростатичного тиску та температури на динаміку зміни електронного та фононного енергетичного спектру.

У п'ятому розділі «Трансформація електронних, оптичних та механічних властивостей ТРЗ $A^{II}B^{VI}$ » проведено теоретичні розрахунки концентраційних залежностей електронних, оптичних та механічних параметрів.

У шостому розділі «Електронний енергетичний спектр тонких напівпровідникових плівок $CdSe_{1-x}S_x$ при взаємодії їх поверхні з газами» встановлено трансформацію електронного енергетичного спектру та оптичних властивостей тонких плівок при взаємодії їх поверхні із молекулами CO , H_2 та NO_2 .

За результатами кожного розділу і загалом у кінці роботи автором зроблені ґрунтовні логічні висновки. Дисертаційна робота А.І. Кашуби є добре структурована. Витримано логічну послідовність викладу результатів дослідження.

Зв'язок дисертації з науковими темами й програмами

Дисертаційна робота виконана на кафедрі загальної фізики Національного університету «Львівська політехніка» та відповідно до тематики держбюджетних та господарчо-договірних науково-дослідних робіт:

– «Сонячні елементи на основі варізонних структур A^2B^6 та A^3B^5 з впровадженими нанорозмірними об'єктами» (номер державної реєстрації 0117U004448, термін виконання 2017–2018 р.);

– «Багатоколірні люмінесцентні наномаркери для біомедичних досліджень» (номер державної реєстрації 0116U008071, термін виконання 2016–2018 р.);

– «Формування варізонних плівкових структур на основі $CdSe_xTe_{1-x}$ для сонячних елементів та оптимізація їх властивостей» (номер державної реєстрації 0119U002247, термін виконання 2019–2021 р.);

– «Електронні та екситонні стани в новітніх іонних напівпровідниках типу органічно-неорганічних перовськітів» (номер державної реєстрації 0119U002205, термін виконання 2019–2021 р.);

– «Ефективні тонкоплівкові газові сенсори на основі сполук групи $A^{II}B^{VI}$ » (номер державної реєстрації 0121U108649, термін виконання 2021–2023 р.);

– «Хаотичні стани в модульованих системах» (номер державної реєстрації 0122U001693, термін виконання 2022–2024 р.);

– «Нові моно-, полі-, нанокристалічні матеріали подвійного призначення для акумуляторів, накопичувачів водню, сенсорної техніки та електроніки» (номер державної реєстрації 0123U100599, термін виконання 2023–2025 р.);

– «Формування та оптимізація властивостей плівкових структур на основі твердих розчинів $\text{CdSe}_{1-x}\text{S}_x$ і $\text{CdTe}_{1-x}\text{Se}_x$ для оптоелектронних систем» (номер державної реєстрації 2022.01/0163, термін виконання 2023–2024 р.);

– Договір № 1031 «Визначення параметрів електрохімічних комірок та батареї суперконденсаторів на їх основі» (2018–2019 р.). (Національний університет «Львівська політехніка» – ТзОВ «АПОВЕРКЕП» (в рамках Project No. 730798, Call: H2020-FTIPilot-2016)).

– Договір № 80 «Дослідження характеристик батареї суперконденсаторів за різних умов експлуатації» (15.04.2019–27.06.2019 р.). (Національний університет «Львівська політехніка» – ТзОВ «АПОВЕРКЕП» (в рамках Project No. 730798, Call: H2020-FTIPilot-2016)).

Дисертант був керівником науково-дослідної роботи («Ефективні тонкоплівкові газові сенсори на основі сполук групи $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$ » (номер державної реєстрації 0121U108649, термін виконання 2021–2023 р.)), брав участь у дослідженнях та підготовленні проміжних і заключних звітів.

Практична цінність і пропозиції стосовно використання одержаних результатів

Результати дисертаційного дослідження спрямовані на вирішення важливих фундаментальних та прикладних проблем розроблення, модифікації та вдосконалення тонкоплівкових структур для їх застосування в оптико-електронних пристроях. В роботі запропоновано нові методи та способи модифікації тонких плівок матеріалів групи $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$ та ТРЗ на їх основі. Дані результати, можуть мати реалізацію в технологічних процесах виробництва сонячних елементів на основі даних сполук. Встановлено оптимальні компонентні співвідношення в ТРЗ халькогенідів кадмію, які

можуть бути використані в якості оптичного «вікна» та поглинаючого шару сонячного елемента.

Проведено систематичне вивчення усіх компонент сонячного елемента (матеріалів, які можуть використовуватись в якості прозорого провідного шару, емітера, поглинаючого шару і тильного контакту). На основі аналізу проведених експериментальних і теоретичних результатів досліджень, а також враховуючи економічну та технологічну складові встановлено, що найбільш оптимальними компонентами для сонячного елемента є: ZnO:Al (використання в якості прозорого провідного шару), $\text{CdSe}_{1-x}\text{S}_x$ з $x > 0.6$ (використання в якості емітера), $\text{CdTe}_{1-x}\text{Se}_x$ $x = 0.08-0.11$ (використання в якості поглинаючого шару), купрум вмісні сполуки (CuO) (використання в якості тильного контакту).

Досліджено взаємодію поверхні ТРЗ $\text{CdSe}_{1-x}\text{S}_x$ з різними типами газів (CO , H_2 та NO_2). Встановлено трансформацію основних оптико-електронних параметрів та проаналізовано можливе використання даних сполук в якості газових сенсорів.

Повнота викладення матеріалів дисертації в публікаціях та особистий внесок автора

Основні результати дисертації опубліковано в 64 наукових працях, серед яких 24 статті у виданнях, які індексуються міжнародними наукометричними базами даних Web of Science та/або Scopus, 5 статей у наукових фахових виданнях України, 1 розділ монографії у закордонному виданні, індексованому наукометричною базою даних Scopus, 3 монографії, 2 патенти України та 29 публікації у матеріалах і тезах доповідей міжнародних і всеукраїнських наукових конференцій, з яких одна індексується наукометричною базою даних Scopus.

Статті у наукових періодичних виданнях, які включені до міжнародних наукометричних баз SCOPUS та/або Web of Science

1. Refractive index and optical dielectric function of CdTe_{0.9}Se_{0.1} thin film obtained by quasi close-space sublimation method / **A. Kashuba**, H. Ilchuk, I. Semkiv, I. Kuno, N. Pokladok, N. Ukrainets // *Functional Materials*. 2023. Vol. 30, № 3. P. 332–337. DOI: <https://doi.org/10.15407/fm30.03.332>

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, встановлення спектральної залежності показника заломлення та аналіз отриманих результатів.

2. *Ab initio* studies of elastic properties of the cubic solid-state CdTe_{1-x}Se_x solutions / **A.I. Кашуба** // *J. Phys. Stud.* 2023. Vol. 27, № 2. P. 2601(7). DOI: <https://doi.org/10.30970/jps.27.2601>

3. Influence of metal atom substitution on the electronic and optical properties of solid-state Cd_{0.75}X_{0.25}Te (X= Cu, Ag and Au) solutions / **A.I. Kashuba** // *Physics and Chemistry of Solid State*. 2023. Vol. 24, № 1. P. 92–101. DOI: <https://doi.org/10.15330/pcss.24.1.92-101>

4. *Ab initio* studies of elastic properties of CdSe_{1-x}S_x solid state solution / I.V. Semkiv, **A.I. Kashuba**, H.A. Ilchuk, B. Andriyevsky, N.Yu. Kashuba, M.V. Solovyov // *Journal of Nano- and Electronic Physics*. 2023. Vol. 15, № 2. P. 02014(7). DOI: [https://doi.org/10.21272/jnep.15\(2\).02014](https://doi.org/10.21272/jnep.15(2).02014)

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, розрахунок концентраційної залежності пружних модулів та проведення їхнього аналізу.

5. Optical properties of CdSe thin films with different thicknesses obtained by the method of high-frequency magnetron sputtering / **A.I. Kashuba**, H.A. Ilchuk, I.V. Semkiv, B. Andriyevsky, Y.M. Storozhuk, R.Y. Petrus // *Romanian Journal of Physics*. 2023. Vol. 68, № 5–6. P. 204(17).

Особистий внесок здобувача: проведення експерименту з вимірювання спектрів пропускання та відбивання, осадження плівок, а також інтерпретація одержаних результатів.

6. *Ab initio* studies of the gas adsorption on the surface CdSe_{1-x}S_x ultra-thin films/ **A.I. Kashuba**, I.V. Semkiv, B. Andriyevsky, H.A. Ilchuk, N.Y. Kashuba // *Applied Nanoscience*. 2023. Vol. 13, № 10. P. 6749–6759. DOI: <https://doi.org/10.1007/s13204-023-02771-z>

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, проведення розрахунків енергетичних діаграм, інтерпретація теоретичних розрахунків.

7. Concentration dependences of electronic band structure of CdSe_{1-x}S_x thin films/ **A.I. Kashuba**, B. Andriyevsky, I.V. Semkiv, T.S. Malyi, R.Y. Petrus // *Applied Nanoscience*. 2023. Vol. 13, № 7. P. 4761–4770. DOI: <https://doi.org/10.1007/s13204-022-02613-4>

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, розрахунок та побудова енергетичних діаграм та спектрів оптичних констант, інтерпретація теоретичних розрахунків.

8. Pressure effect on the electronic spectra of CdSe and CdS / **A.I. Kashuba**, H.A. Ilchuk, B. Andriyevsky, R.Y. Petrus, I.V. Semkiv, R.R. Guminilovych // *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. 2023. Vol. 751, № 1. P. 5812–5818. DOI: <https://doi.org/10.1080/15421406.2022.2073527>

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, розрахунок енергетичних діаграм, встановлення залежностей енергетичних рівнів від тиску, інтерпретація теоретичних розрахунків.

9. First-principle calculations of electron, phonon, optic and thermodynamic properties of CdSe and CdS crystals/ **A.I. Kashuba**, I.V. Semkiv, H.A. Ilchuk, R.Y. Petrus, V.M. Kordan, S.V. Shyshkovskiy // *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*. 2022. Vol. 24, № 9–10. P. 477–486.

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, розрахунок фононного енергетичного спектру, інтерпретація теоретичних розрахунків.

10. Calculation of the vibrational spectra of CdSe and CdS crystals with zinc blende structure / **A.I. Kashuba**, B. Andriyevsky, I.V. Semkiv, R.Yu. Petrus, H.A. Ilchuk, S.V. Shyshkovskiy // *Materials Today: Proceedings*. 2022. Vol. 62, № 9. P. 5812–5818. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2022.03.495>

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, розрахунок фононного енергетичного спектру та термодинамічних властивостей, інтерпретація теоретичних розрахунків.

11. Electron, phonon, optical and thermodynamic properties of CdTe crystal calculated by DFT / H.A. Ilchuk, L.I. Nykyruy, **A.I. Kashuba**, I.V. Semkiv, M.V. Solovyov, B.P. Naidych, V.M. Kordan, L.R. Deva, M.S. Karkulovska, R.Y. Petrus // *Physics and Chemistry of Solid State*. 2022. Vol. 23, № 2. P. 261–269. DOI: <https://doi.org/10.15330/pcss.23.2.261-269>

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, розрахунок електронного енергетичного спектру та оптичних властивостей, інтерпретація теоретичних розрахунків.

12. Growth, crystal structure and theoretical studies of energy and optical properties of CdTe_{1-x}Se_x thin films / **A.I. Kashuba**, H.A. Ilchuk, R.Yu. Petrus, B. Andriyevsky, I.V. Semkiv, E.O. Zmiyovska // *Applied Nanoscience*. 2022. Vol. 12, № 3. P. 335–342. DOI: [10.1007/s13204-020-01635-0](https://doi.org/10.1007/s13204-020-01635-0)

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, проведення експериментальних досліджень спектру оптичного пропускання та його аналіз, розрахунок електронного енергетичного спектру, інтерпретація експериментальних і теоретичних розрахунків.

13. Вплив тиску на електронний енергетичний спектр кристалу сульфїду кадмію зі структурою сфалерит / **А.І. Кашуба**, Б. Андрієвський, І.В.

Семків, Г.А. Ільчук, М.Я. Рудиш, П.А. Щепанський, М.С. Каркульовська, Р.Ю. Петрусь // *Журнал фізичних досліджень*. 2022. Т. 26, № 1. С. 1701-1–1701-6. DOI: 10.30970/jps.26.1701

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, розрахунок енергетичних діаграм, встановлення залежностей енергетичних рівнів від тиску, інтерпретація теоретичних розрахунків.

14. First-principle calculations of band energy structure of CdSe_{0.5}S_{0.5} solid state solution thin films / **A.I. Kashuba**, B. Andriyevsky, I.V. Semkiv, H.A. Ilchuk, R.Yu. Petrus, Y.M. Storozhuk // *Physics and Chemistry of Solid State*. 2022. Vol. 23, № 1. P. 52–56. DOI: 10.15330/pcss.23.1.52-56

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, розрахунок електронного енергетичного спектру, інтерпретація теоретичних розрахунків.

15. Electronic band structure of cubic solid-state CdTe_{1-x}Se_x solutions / H.A. Ilchuk, B. Andriyevsky, O.S. Kushnir, **A.I. Kashuba**, I.V. Semkiv, R.Yu. Petrus // *Ukrainian Journal of Physical Optics*. 2021. Vol. 22, № 2. P. 101–109. DOI: 10.3116/16091833/22/2/101/2021

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, розрахунок електронного енергетичного спектру, інтерпретація теоретичних розрахунків.

16. Electronic structure and elastic properties of Cd₁₆Se₁₅Te solid state solution: first principles study / **A.I. Kashuba**, B. Andriyevsky, H.A. Ilchuk, R.Yu. Petrus, T.S. Malyi, I.V. Semkiv // *Condensed Matter Physics*. 2021. Vol. 24, № 2. P. 23702-1–23702-10. DOI: 10.5488/CMP.24.23702

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, розрахунок пружних постійних та швидкостей звуку, інтерпретація теоретичних розрахунків.

17. Optical and dispersion parameters of the Al-doped ZnO Thin film / **A.I. Kashuba**, B. Andriyevsky, H.A. Ilchuk, R.Yu. Petrus, T.S. Malyi, I.V. Semkiv //

Journal of Nano- and Electronic Physics. 2021. Vol. 13, № 4. P. 04006-1–04006-7. DOI: 10.21272/jnep.13(4).04006

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, проведення експериментальних досліджень спектру оптичного пропускання та його аналіз, розрахунок спектральної поведінки оптичних функцій, інтерпретація експериментальних результатів.

18. Optical properties of Al-doped ZnO thin films obtained by the method of high-frequency magnetron sputtering / **A. Kashuba**, H. Ilchuk, R. Petrus, I. Semkiv, O. Bovgyra, M. Kovalenko, V. Dzikovskyi // *Modern Physics Letters B*. 2021. Vol. 35, № 11. P. 2150189. DOI: 10.1142/S021798492150189X

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, проведення експериментальних досліджень спектру оптичного пропускання, осадження плівок, інтерпретація експериментальних результатів.

19. Розмірний ефект у тонких плівках CdS / Г.А. Ільчук, **А.І. Кашуба**, Р.Ю. Петрусь, І.В. Семків, В.М. Кордан // *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*. 2021. Т. 19, № 1. С. 139–146.

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, проведення експериментальних досліджень спектру оптичного пропускання, осадження плівок, інтерпретація експериментальних результатів.

20. Growth, crystal structure and optical properties of CdTe_{1-x}Se_x thin films prepared by quasi close-space sublimation method / R. Petrus, H. Ilchuk, **A. Kashuba**, I. Semkiv, N. Ukrainets // *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. 2021. Vol. 717, № 1. P. 128–135. DOI: 10.1080/15421406.2020.1860538

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, проведення експериментальних досліджень спектрів оптичного пропускання, відбивання і поглинання, інтерпретація експериментальних результатів.

21. Elastic properties of $\text{CdTe}_{1-x}\text{Se}_x$ ($x=1/16$) solid solution: First principles study / H.A. Ilchuk, D.V. Korbutyak, **A.I. Kashuba**, B. Andriyevsky, I.M. Kupchak, R.Y. Petrus, I.V. Semkiv // *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*. 2020. Vol. 23, № 4. P. 355–360. DOI: 10.15407/SPQEO23.04.355

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, розрахунок пружних постійних, інтерпретація теоретичних розрахунків.

22. Динаміка зміни електронних та оптичних властивостей твердих розчинів заміщення $\text{CdSe}_{1-x}\text{S}_x$ / Г.А. Ільчук, Е.О. Височанська, Р.Ю. Петрусь, І.В. Петрович, І.В. Семків, **A.I. Кашуба** // *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*. 2020. Т. 18, № 1. С. 59–75.

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, розрахунок електронних енергетичних спектрів та встановлення концентраційних залежностей, інтерпретація теоретичних розрахунків.

23. Optical properties of CdMnTe film: experimental and theoretical aspects / H. Ilchuk, E. Zmiiovska, R. Petrus, I. Semkiv, I. Lopatynskyi, **A. Kashuba** // *Journal of Nano- and Electronic Physics*. 2020. Vol. 12, № 1. P. 01027-1 (4pp). DOI: 10.21272/jnep.12(1).01027

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, розрахунок оптичних, експериментальне вимірювання спектрів оптичного пропускання, інтерпретація експериментальних і теоретичних результатів.

24. Transformation of band energy structure of solid solutions CdMnTe / R.Yu. Petrus, H.A. Ilchuk, V.M. Sklyarchuk, **A.I. Kashuba**, I.V. Semkiv, E.O. Zmiiovska // *Journal of Nano- and Electronic Physics*. 2018. Vol. 10, № 6. P. 06042 (5pp). DOI: 10.21272/jnep.10(6).06042

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, розрахунок електронних енергетичних спектрів та встановлення концентраційних залежностей, інтерпретація теоретичних розрахунків.

Статті у наукових фахових виданнях України

25. Pressure effect on the electronic spectra of CdTe crystal calculated by DFT / **A.I. Kashuba**, I.V. Semkiv, H.A. Ilchuk, R.Y. Petrus // *Вісник Львівського університету. Серія: фізична.* 2022. Вип. 59. Р. 3–14. DOI: <https://doi.org/10.30970/vph.59.2022.3>

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, розрахунок енергетичних діаграм, встановлення залежностей енергетичних рівнів від тиску, інтерпретація теоретичних розрахунків.

26. Синтез, структура та оптичні властивості полікристалів і тонких плівок $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ / **A.I. Кашуба**, I.B. Семків, Г.А. Ільчук, Е.О. Височанська, В.М. Кордан, Р.Ю. Петрусь // *Наукові нотатки.* 2022. Вип. 74. С. 94–101. DOI: [10.36910/775.24153966.2022.74.16](https://doi.org/10.36910/775.24153966.2022.74.16)

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, проведення експериментальних досліджень спектрів оптичного пропускання, розрахунок і аналіз структурних параметрів, інтерпретація експериментальних результатів.

27. Вплив легування алюмінієм на кінетичні властивості тонких плівок оксиду цинку / **A.I. Кашуба**, I.B. Семків, Р.Ю. Петрусь, Н.Ю. Кашуба, Н.А. Українець // *Вимірювальна та обчислювальна техніка в технологічних процесах.* 2021. Вип. 1(67). С. 82–96. DOI: <https://doi.org/10.31891/2219-9365-2021-67-1-13>

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, проведення експериментальних досліджень спектру оптичного пропускання, інтерпретація експериментальних результатів.

28. Осадження та оптична характеристика тонких плівок телуриду кадмію / С.А. Першина, **А.І. Кашуба**, І.В. Семків, Я.М. Сторожук, Г.А. Ільчук, Р.Ю. Петрусь // *Вісник Львівського університету. Серія: фізична.* 2021. Вип. 58. С. 3–15. DOI: <https://doi.org/10.30970/vph.58.2021.3>

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, проведення експериментальних досліджень спектру оптичного пропускання, осадження плівок, інтерпретація експериментальних результатів.

29. Фізико-технологічні умови осадження тонких плівок халкогенідів кадмію методом ХПО, КЗО та ВЧ- магнетронного напилення / Г.А. Ільчук, **А.І. Кашуба**, І.В. Семків, Р.Р. Гумінілович // *Вісник Львівського університету. Серія: фізична.* 2023. Вип. 60. Р. 101–115. DOI: <https://doi.org/10.30970/vph.60.2023.101>

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, проведення осадження тонких плівок, інтерпретація експериментальних вимірювань.

Патенти України

30. Пат. № 143137 Україна, МПК Н01L 27/14 (2006.01). Система сублімації в замкненому об'ємі для осадження варізонних напівпровідникових матеріалів A^2B^6 / Ільчук Г.А., Круковський С.І., Петрусь Р.Ю., Семків І.В., **Кашуба А.І.**, Змійовська Е.О. Заявник і власник – Національний університет "Львівська політехніка". – № u202000985, заявл. 17.02.2020; опубл. 10.07.2020, Бюл. №13.

Особистий внесок здобувача: брав участь у постановці задачі, запропоновано модель комірки для джерела.

31. Патент на корисну модель України. Датчик температури / Кашуба А.І., Франів А.В., Куньо І.М., Бовгира О.В. Заявник і власник – Львівський національний університет імені Івана Франка. – № u201911253; заявл. 19.11.2019; опубл. 12.05.2020, Бюл. № 9.

Особистий внесок здобувача: брав участь у постановці задачі, проводив експериментальні дослідження.

Розділи монографії

32. Directional Synthesis of CdX (X= S, Se, and Te) Thin Films for Solar Cell Application / H.A. Ilchuk, R.Y. Petrus, I.V. Semkiv, **A.I. Kashuba**. In: Fesenko, O., Yatsenko, L. (eds) Nanooptics and Photonics, Nanochemistry and Nanobiotechnology, and Their Applications. Springer Proceedings in Physics, Vol 247. Springer, Cham., 2020. P. 117–128. (*Scopus*)

ISBN: 978-3-030-52267-4; DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-030-52268-1_9

Особистий внесок здобувача: брав участь у постановці задачі, узагальнено електронні енергетичні спектри і їх основні параметри.

Монографії

33. Multifunctional materials for electronics based on cadmium chalcogenides thin films: колективна монографія / H. Ilchuk, R. Petrus, I. Semkiv, **A. Kashuba**. – Lviv: Publishing house "Levada", 2021. 162 p. (*Рекомендовано Вченою радою Національного університету "Львівська політехніка" (Протокол № 73 від 27.04.2021 р.)*); ISBN: 978-617-8070-03-8

Особистий внесок здобувача: брав участь у постановці задачі, узагальнено оптично-електронних властивостей тонких плівок халькогенідів кадмію.

34. Basic physical properties of thin films of cadmium chalcogenides / **A. Kashuba**, I. Semkiv, O. Kushnir. Riga, Latvia: LAP Lambert Academic Publishing, 2021. 136 p. ISBN: 978-620-3-58280-2

Особистий внесок здобувача: брав участь у постановці задачі, узагальнено оптичних властивостей тонких плівок халькогенідів кадмію.

35. Physical properties of layered crystals with cation substitution / **A. Kashuba**. – Beau Bassin, Mauritius: LAP LAMBERT Academic Publishing RU, 2019. 57 p.

ISBN: 978-613-9-99285-0

Матеріали конференцій, індексовані SCOPUS та/або Web of Science

36. **Kashuba A.**, Kushnir O., Ilchuk H., Andriyevsky B., Semkiv I., Petrus R. *Ab initio* calculations of electronic band structure, optical and elastic parameters of solid-state CdTe–CdSe solutions // Electronics and information technologies : proceedings of 2021 IEEE 12th International conference ELIT (Lviv, Ukraine, May 19–21, 2021). – 2021. – С. 154–158. (*Scopus*) DOI: 10.1109/ELIT53502.2021.9501155

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, розрахунок пружних постійних, інтерпретація теоретичних розрахунків.

Матеріали та тези доповідей на конференціях

37. **Kashuba A.**, Andriyevsky B., Rudysh M., Semkiv I., Ilchuk H., Shchepanskyi P. Refractive index of CdTe_{1-x}Se_x thin films estimated by Swanepoel's method // VI Polish-Lithuanian-Ukrainian Meeting on Physics of Ferroelectrics (11-15 September 2023, Częstochowa, Poland). – 2023. – P. 68.

Особистий внесок здобувача: постановка задачі та обробка результатів вимірювань.

38. **Кашуба А.І.**, Семків І.В., Соловійов М.В. Спектральна поведінка показника заломлення тонких плівок CdSe // «Оптика і спектроскопія кристалів»: матеріали наукового семінару присвяченого 150-річчю кафедри експериментальної фізики Львівського національного університету імені Івана Франка (Львів, 8 грудня 2022 р.). – 2022. – С. 43–45.

Особистий внесок здобувача: обробка результатів вимірювань.

39. **Kashuba A.I.**, Andriyevsky B., Ilchuk H.A., Semkiv I.V., Kashuba N.Y. Optical gap bowing parameter and spin-orbit splitting in CdSe_{1-x}S_x ultra-thin films // Abstract Book of International research and practice conference: Nanotechnology and Nanomaterials (NANO-2023) (16-19 August 2023, Bukovel, Ukraine). – 2023. – P. 366.

Особистий внесок здобувача: проведення осадження тонких плівок, вимірювання та обробка результатів вимірювань.

40. **Кашуба А.** Синтез та оптичні властивості тонких плівок твердих розчинів заміщення CdSe_{1-x}S_x // Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики «ЄВРИКА–2023»: тези доповідей (Львів, 16–18 травня 2023 р.). – 2023. – С. А3.

41. **Kashuba A.I.**, Andriyevsky B. Growth and crystal structure of CdTe_{1-x}Se_x ($x > 0.75$) thin films prepared by the method of high-frequency magnetron sputtering // III International advanced study conference «Condensed matter and low temperature physics» (Kharkiv, 5-11 June, 2023). – 2023. – P. 164.

Особистий внесок здобувача: проведення осадження тонких плівок та обробка результатів вимірювань.

42. **Kashuba A.**, Semkiv I., Kuno V., Kashuba N., Storozhuk Y. Elastic properties of cubic solid-state CdTe_{1-x}Se_x solutions Молодіжна наука заради миру та розвитку: збірник матеріалів міжнародної науково-практичної

конференції, присвячена Всесвітньому дню науки (Чернівці, 9–11 листопада 2022 р.). – 2022. – С. 341–345.

Особистий внесок здобувача: проведення теоретичних розрахунків та аналіз результатів.

43. **Kashuba A.**, Ilchuk H., Semkiv I., Solovyov M. Elastic properties of $\text{CdSe}_{1-x}\text{S}_x$ solid state solution // Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЕВРИКА–2022: тези доповідей, (Львів, 18–20 жовтня 2022 р.). – 2022. – С. А2.

Особистий внесок здобувача: проведення теоретичних розрахунків та аналіз результатів.

44. **Kashuba A.I.**, Semkiv I.V., Andriyevsky B., Ilchuk H.A., Kashuba N.Y., Petrus R.Y. *Ab initio* studies of the gas adsorption on the surface $\text{CdSe}_{1-x}\text{S}_x$ ultra-thin films // Abstract Book of International research and practice conference: Nanotechnology and Nanomaterials (NANO-2022) (25-27 August 2022, Lviv, Ukraine). – 2022. – P. 373.

Особистий внесок здобувача: постановка задачі, проведення теоретичних розрахунків та аналіз результатів.

45. **Кашуба А.І.**, Ільчук Г.А., Семків І.В., Височанська Е.О., Соловійов М.В. Синтез, структура та оптичні властивості полікристалів і тонких плівок $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ // Фізика і хімія твердого тіла. Стан, досягнення і перспективи: матеріали VII Всеукраїнської науково-практичної конференції здобувачів вищої освіти та молодих вчених (Луцьк, 21–22 жовтня 2022 р.). – 2022. – С. 13–14.

Особистий внесок здобувача: проведення синтезу та оптичних вимірювань.

46. **Kashuba A.I.**, Semkiv I.V., Ilchuk H.A., Kashuba N.Y., Ukrainets N.A., Petrus R.Y. Pressure effect on the electronic spectra of cadmium telluride crystal calculated by DFT level // Напівпровідникові матеріали, інформаційні

технології та фотовольтаїка: тези доповідей VII Міжнародної науково-практичної конференції (Кременчук, 14–16 травня 2022 р.). – 2022. – Р. 12–13.

Особистий внесок здобувача: проведення теоретичних розрахунків та аналіз результатів.

47. Ільчук Г.А., Височанська Е.О., **Кашуба А.І.**, Семків І.В., Соловійов М.В., Петрусь Р.Ю. Структура та аналіз поверхні твердих розчинів заміщення $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ // Напівпровідникові матеріали, інформаційні технології та фотовольтаїка: тези доповідей VII Міжнародної науково-практичної конференції (Кременчук, 14–16 травня 2022 р.). – 2022. – С. 39–40.

Особистий внесок здобувача: проведення синтезу зразків.

48. Ilchuk H, Petrus R., Semkiv I., **Kashuba A.** Optical properties of $\text{CdTe}_{1-x}\text{Se}_x$ thin films obtained by the quasi close-space sublimation method // Фізика, електроніка, електротехніка: матеріали та програма міжнародної науково-технічної конференції студентів та молодих вчених (Суми, 19–23 квітня 2021р.). – 2021. – Р. 52–53.

Особистий внесок здобувача: проведення аналізу оптичних вимірювань.

49. **Kashuba A.I.**, Ilchuk H.A., Andriyevsky B., Petrus R.Y., Semkiv I.V., Guminilovych R.R. Pressure effect on electron spectra of CdSe and CdS // Nanotechnology and nanomaterials (NANO–2021): book of abstract international research and practice conference (25–27 August 2021, Lviv, Ukraine). – 2021. – Р. 312.

Особистий внесок здобувача: проведення теоретичних розрахунків та аналіз результатів.

50. **Kashuba A.I.**, Petrus R.Y., Ilchuk H.A., Semkiv I.V., Andriyevsky B., Piasecki M., Kashuba N.Y., Malyi T.S. Influence of the thickness on optical

properties of CdSe thin films // Nanotechnology and nanomaterials (NANO–2021): book of abstract International research and practice conference (25–27 August 2021, Lviv, Ukraine). – 2021. – P. 311.

Особистий внесок здобувача: проведення синтезу та оптичних вимірювань.

51. **Kashuba A.**, Andriyevsky B., Semkiv I., Ilchuk H., Petrus R., Shyshkovskiy S. Calculation of the vibrational spectra of CdSe and CdS crystals with zinc blende structure // XVIII Міжнародна Фреїківська конференція з фізики і технології тонких плівок та наносистем (Івано-Франківськ, 11–16 жовтня 2021 р.). – 2021. – P. 166.

Особистий внесок здобувача: проведення теоретичних розрахунків та аналіз результатів.

52. **Kashuba A.**, Andriyevsky B., Semkiv I., Ilchuk H., Petrus R., Storozhuk Ya. First-principle calculations of band energy structure of CdSeS solid state solution thin films // XVIII Міжнародна Фреїківська конференція з фізики і технології тонких плівок та наносистем (Івано-Франківськ, 11–16 жовтня 2021 р.). – 2021. – P. 145.

Особистий внесок здобувача: проведення теоретичних розрахунків та аналіз результатів.

53. **Kashuba A.**, Guminilovych R., Ilchuk H., Andriyevsky B., Kordan V., Semkiv I., Petrus R., Malyi T. Effect of annealing on optical properties of cadmium sulfide thin films // Condensed matter and low temperature physics 2021: program and book of abstracts II International advanced study conference (6–2 June 2021, Kharkiv). – 2021. – P. 94.

Особистий внесок здобувача: проведення відпалу та оптичних вимірювань.

54. **Kashuba A.**, Petrus R., Andriyevsky B., Piasecki M. Influence of the thickness on optical properties of cadmium sulfide thin films // Middle European

cooperation in statistical physics MECO46: book of abstracts 46th International conference (11–13 May 2021, Riga, Latvia). – 2021. – P. 85.

Особистий внесок здобувача: проведення синтезу та оптичних вимірювань.

55. **Kashuba A.**, Andriyevsky B., Semkiv I., Ilchuk H., Petrus R., Pershyna S. Electron and phonon spectra of CdSe and CdS crystals // Materials science and surface engineering (MSSE2021): proceedings international young scientists conference (22–24 September 2021, Lviv, Ukraine). – 2021. – P. 64–67.

Особистий внесок здобувача: проведення теоретичних розрахунків та аналіз результатів.

56. **Kashuba A.** Effect of Al doping on the optical band gap of ZnO thin film // Фізика, електроніка, електротехніка: матеріали та програма міжнародної науково-технічної конференції студентів та молодих вчених (Суми, 19–23 квітня 2021р.). – 2021. – P. 56–57.

57. **Кашуба А.І.**, Семків І.В., Ільчук Г.А., Петрусь Р.Ю. Оптоелектронні параметри тонких плівок ZnO:Al // «Лашкарьовські читання – 2021» з міжнародною участю: збірник тез конференції молодих вчених з фізики напівпровідників (Київ, 5–7 квітня 2021 р.). – 2021. – С. 4–5.

Особистий внесок здобувача: проведення синтезу, оптичних вимірювань та їх аналіз.

58. Першина С.А., **Кашуба А.І.**, Семків І.В. Осадження та оптична характеристика тонких плівок телуриду кадмію // ЕВРИКА–2021: тези доповідей міжнародної конференції студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики (Львів, 18–20 травня 2021 р.). – 2021. – С. В5.

Особистий внесок здобувача: проведення синтезу та оптичних вимірювань.

59. **Kashuba A.**, Ilchuk H., Petrus R., Semkiv I., Zmiiivska E. Growth, crystal structure and theoretical studies of energy and optical properties of

CdTe_{1-x}Se_x thin films // Nanotechnology and nanomaterials (NANO-2020): abstract book International research and particle conference (26–29 August 2020, Lviv, Ukraine). – 2020. – P. 309.

Особистий внесок здобувача: проведення синтезу, оптичних вимірювань та теоретичних розрахунків.

60. **Kashuba A.**, Ilchuk H., Petrus R., Andriyevsky B., Bovgyra O., Semkiv I., Kovalenko M., Dzikovskyi V. Growth, crystal structure and optical properties of Al-doped ZnO thin films // Electronic processes in organic and inorganic materials : abstracts of the XII International conference (1–5 June 2020, Kamianets-Podilskyi). – 2020. – P. 66.

Особистий внесок здобувача: проведення синтезу та оптичних вимірювань.

61. Petrus R., Ilchuk H., **Kashuba A.**, Semkiv I., Ukrainets N. Growth, crystal structure and optical properties of CdTe_{1-x}Se_x thin films prepared by quasi close-space sublimation method // Electronic processes in organic and inorganic materials: abstracts of the XII International conference (1–5 June 2020, Kamianets-Podilskyi). – 2020. – P. 78.

Особистий внесок здобувача: проведення синтезу та оптичних вимірювань.

62. Петрусь Р.Ю., Ільчук Г.А., **Кашуба А.І.**, Семків І.В., Височанська Е.О., Українець Н.А. Плівки твердого розчину CdTeSe, вирощені методом квазізамкненого об'єму // Напівпровідникові матеріали, інформаційні технології та фотовольтаїка: тези доповідей VI Міжнародної науково-практичної конференції (Кременчук, 14–16 травня 2020 р.). – 2020. – С. 13–14.

Особистий внесок здобувача: проведення синтезу.

63. Semkiv I., Ilchuk H., Petrus R., **Kashuba A.**, Zmiiovska E. Optical and electronic characteristics of the CdMnTe solid solution // XVII Міжнародна

Фреїківська конференція з фізики і технології тонких плівок та наносистем (Івано-Франківськ, 20–25 травня 2019 р.). – 2019. – Р. 330.

Особистий внесок здобувача: проведення синтезу, оптичних вимірювань та теоретичних розрахунків.

64. Семків І.В., Ільчук Г.А., **Кашуба А.І.**, Петрусь Р.Ю., Зміївська Е.О. Вплив концентрації Mn на ширину забороненої зони твердого розчину заміщення CdMnTe // 15-та відкрита наукова конференція Інституту прикладної математики та фундаментальних наук (ІМФН) (Львів, 13–14 листопада 2018 р.). – 2018. – С. 65.

Особистий внесок здобувача: проведення теоретичних розрахунків.

Особистий внесок здобувача

Особистий внесок здобувача в отриманні наукових результатів є наступним: усі експериментальні та теоретичні результати, викладені в дисертації, автор отримав самостійно, а також у співпраці з іншими співавторами. Планування експериментальних і теоретичних досліджень, обговорення одержаних результатів та висновків, постановка мети і завдань роботи, вибір об'єкту і предмету досліджень було проведено спільно з науковим консультантом доктором фізико-математичних наук, професором Ільчуком Г.А. Основні наукові положення, що виносяться на захист, а також висновки до роботи підготовлені автором особисто.

Зокрема, у всіх опублікованих працях (у відповідності до поданого списку вище) [1–64] дисертанту належить вирішальна роль у постановці задачі, проведенні аналізу результатів досліджень, їх інтерпретації, а також формулюванні висновків. Роботи [2, 3, 35, 40, 56] є одноосібними. Детально про особистий внесок автора вказано у списку опублікованих праць за темою дисертації. Результати дисертації опубліковано в повному обсязі.

Кандидатська дисертація на тему «Трансформація енергетичних зон та оптичних параметрів твердих розчинів заміщення галогенідів індію і талію» за спеціальністю 01.04.10 – фізика напівпровідників та діелектриків захищена 2018 року в Львівському національному університеті імені Івана Франка. Її матеріали в тексті докторської дисертації не використовувалися.

Апробація результатів дисертації

Основні результати та положення досліджень, які подані в дисертаційній роботі, були представлені на вітчизняних і міжнародних наукових конференціях та семінарах, зокрема особисто здобувачем у формі усних та стендових доповідей: VI Polish-Lithuanian-Ukrainian Meeting on Physics of Ferroelectrics (11-15 September, 2023 – Częstochowa, Poland); «Лашкарьовські читання» Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників (4–5 квітня 2023 р. – Київ, Україна); Nanotechnology and nanomaterials (NANO–2023): International research and practice conference (16–19 August, 2023 – Lviv, Ukraine); Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЕВРИКА–2023 (16–18 травня 2023 р. – Львів, Україна); III International Advanced Study Conference Condensed Matter and Low Temperature Physics (CM<P 2023) (5–11 June, 2023 – Kharkiv, Ukraine); Міжнародна науково-практична конференція, присвячена Всесвітньому дню науки «Молодіжна наука заради миру та розвитку» (Чернівці, 9–11 листопада 2022 р.); Всеукраїнської науково-практичної конференції здобувачів вищої освіти та молодих вчених «Фізика і хімія твердого тіла. Стан, досягнення і перспективи» (21–22 жовтня 2022 р. – Луцьк, Україна); Міжнародна конференція студентів і молодих

науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЕВРИКА–2022 (18–20 жовтня 2022 р. – Львів, Україна); Nanotechnology and nanomaterials (NANO–2022): International research and practice conference (25–27 August, 2022 – Lviv, Ukraine); VII Міжнародна науково-практична конференція «Напівпровідникові матеріали, інформаційні технології та фотовольтаїка» (14–16 травня 2022 р. – Кременчук, Україна); 2021 XIIth International Conference on Electronics and Information Technologies (ELIT) (19–21 May, 2021 – Lviv, Ukraine); Міжнародна науково-технічна конференція студентів та молодих вчених «Фізика, електроніка, електротехніка» (ФЕЕ-2021) (19–23 квітня 2021р. – Суми, Україна); Nanotechnology and nanomaterials (NANO–2021): International research and practice conference (25–27 August, 2021 – Lviv, Ukraine); XVIII Міжнародна Фреїківська конференція з фізики і технології тонких плівок та наносистем (11–16 жовтня 2021 р. – Івано-Франківськ, Україна); II International Advanced Study Conference Condensed Matter and Low Temperature Physics (CM<P 2021) (6–2 June, 2021 – Kharkiv, Ukraine); The 46th International Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (MECO46) (11–13 May, 2021 – Riga, Latvia); International Young Scientists Conference on Materials Science and Surface Engineering (MSSE2021) (22–24 September, 2021 – Lviv, Ukraine); «Лашкарьовські читання» Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників (5–7 квітня 2021 р. – Київ, Україна); Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЕВРИКА–2021 (18–20 травня 2021 р. – Львів, Україна); Nanotechnology and nanomaterials (NANO-2020): International research and particle conference (26–29 August, 2020 – Lviv, Ukraine); XII International Conference "Electronic Processes in Organic and Inorganic

Materials” (ICEROM-12) (1–5 June, 2020 – Kamianets-Podilskyi, Ukraine); VI Міжнародна науково-практична конференція «Напівпровідникові матеріали, інформаційні технології та фотовольтаїка» (14–16 травня 2020 р. – Кременчук, Україна); XVII Міжнародна Фреїківська конференція з фізики і технології тонких плівок та наносистем (20–25 травня 2019 р. – Івано-Франківськ, Україна); 15-та відкрита наукова конференція Інституту прикладної математики та фундаментальних наук (ІМФН) (13–14 листопада 2018 р. – Львів, Україна).

Дискусійні положення та зауваження

Розгляд дисертаційної роботи дає підстави стверджувати, що її автор, продемонстрував високий рівень володіння матеріалом із теми, що досліджується, у цілому виконав поставлені завдання. Однак, робота не позбавлена дискусійних положень і зауважень, а саме:

- 1) узагальнити та конкретизувати висновки до деяких розділів, зменшивши тим самим їх кількість;
- 2) необхідно краще впорядкувати список літературних джерел та звернути увагу на наявність граматичних описок.

Проте, зроблені зауваження та пропозиції не впливають на загальну високу оцінку дисертації.

Загальний висновок

Під час виконання дисертації Кашуба А.І. дотримувався принципів академічної доброчесності. За результатами перевірки й аналізу не виявлено ознак академічного плагіату, самоплагіату, фабрикації, фальсифікації.

На підставі викладеного вище, доцільно зробити висновок про те, що дисертаційна робота Кашуби Андрія Івановича «Трансформація електронного та фононного енергетичного спектру в тонкоплівкових матеріалах групи $A^{II}B^{VI}$ » за змістом, структурою й оформленням відповідає спеціальності 01.04.18 – фізика і хімія поверхні, є комплексним і завершеним науковим дослідженням, що виконане дисертантом особисто, містить наукові обґрунтовані результати теоретичного та практичного характеру, які мають загальнодержавне значення у розв'язанні важливої науково-прикладної проблеми розробки фізичних основ осадження тонких плівок твердих розчинів заміщення сполук групи $A^{II}B^{VI}$ і з'ясуванню закономірностей трансформації їх оптичних, електронних, фононних і сенсорних властивостей, та характеризуються науковою новизною, що відповідає пунктам 7 і 9 «Порядку присудження (позбавлення) наукових ступенів», затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 17.11.2021 р. № 1197» і дає вагомні підстави рекомендувати дисертацію Кашуби А.І. до захисту в Спеціалізованій вченій раді.

Рецензенти:

доктор фізико-математичних наук,
професор,
професор кафедри загальної фізики



Ігор ЗАЧЕК

доктор фізико-математичних наук,
професор,
професор кафедри загальної фізики



Наталія ТОВСТЮК

доктор фізико-математичних наук,
доцент,
доцент кафедри загальної фізики



Олександр КОЛОМІЄЦЬ