

РЕЦЕНЗІЯ

на дисертаційну роботу Луцюка Юрія Віталійовича
«Вплив просторових обмежень акустичних фононів на термодинамічні та термоелектричні властивості наноплівки гексагональної структури»,
поданої на здобуття наукового ступеня доктора філософії з галузі знань
10 «Природничі науки» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія»

Актуальність дисертаційного дослідження

Дисертаційна робота Луцюка Юрія Віталійовича присвячена дослідженню фізичних процесів у квазідвовимірних кристалічних структурах, які на сьогодні є одним із ключових об'єктів сучасної фізики твердого тіла та нанофізики. Зростаючий інтерес до двовимірних та квазідвовимірних матеріалів зумовлений їх унікальними фізичними властивостями, що істотно відрізняються від об'ємних аналогів і відкривають широкі можливості для практичного застосування у наноелектроніці, оптоелектроніці та термоелектриці. Особливу роль у формуванні теплофізичних і транспортних властивостей таких систем відіграють акустичні фонони, спектр яких істотно змінюється в умовах просторового обмеження. Саме тому дослідження впливу геометричних параметрів наноплівок на характеристики фононного спектра та пов'язані з ними термодинамічні і термоелектричні властивості є актуальним науковим завданням.

Практична цінність роботи

Практична значущість отриманих результатів полягає у можливості їх використання для керування теплофізичними та термоелектричними характеристиками наноструктур шляхом зміни їх геометричних параметрів і температурних умов.

Дисертаційна робота Луцюка Ю.В. містить ґрунтовний аналіз впливу товщини наноплівок і температури на енергетичний спектр акустичних фононів та їхні динамічні характеристики. На основі отриманих результатів встановлено закономірності зміни групових швидкостей акустичних фононів різних поляризацій та визначено їх парціальний внесок у формування

термодинамічних і транспортних характеристик наноструктур, що дає змогу більш точно прогнозувати їх теплофізичні та термоелектричні властивості. Отримано аналітичні залежності спектра акустичних фононів, їх групових швидкостей і розраховано парціальні внески різних поляризацій у формування термодинамічних величин створюють основу для цілеспрямованого проектування матеріалів із заданими теплофізичними та термоелектричними властивостями, а також для реалізації підходів фононного інжинірингу у низьковимірних системах.

Результати роботи можуть бути використані при розробці:

- термоелектричних матеріалів з підвищеною ефективністю;
- наноструктурованих елементів електроніки;
- матеріалів з керованою теплопровідністю.

Особливий інтерес становить встановлена перспективність наноплівки 2H-PbI_2 як потенційних термоелектричних матеріалів, що відкриває можливості для створення енергоефективних пристроїв нового покоління.

Структура і зміст роботи

Дисертаційна робота викладена на 147 сторінках із яких основний текст 112 сторінок. Вона складається зі вступу, чотирьох розділів основної частини, висновків, списку використаних джерел та додатків. У вступі обґрунтовано актуальність теми, сформульовано мету та завдання дослідження, визначено об'єкт, предмет і методи дослідження, а також наведено наукову новизну і практичне значення отриманих результатів.

У *першому розділі* проведено ґрунтовний аналіз літературних джерел, присвячених низьковимірним кристалічним структурам, їх фізичним властивостям та ролі фононних процесів у формуванні характеристик матеріалів.

Другий розділ присвячено розробці аналітичного підходу до дослідження спектра акустичних фононів у наноплівках гексагональної симетрії. Отримано аналітичні залежності для частот і групових швидкостей фононів різних

поляризацій та встановлено закономірності їх зміни зі зменшенням товщини плівки.

У *третьому розділі* досліджено вплив фононного спектра на термодинамічні властивості наноплівки 2H-PbI_2 , зокрема молярну теплоємність, ентропію та вільну енергію. Проведено детальний аналіз внесків різних гілок спектра акустичних фононів у формування цих величин.

Четвертий розділ присвячено дослідженню транспортних і термоелектричних властивостей наноплівки, включаючи теплопровідність, термодифузію та термоелектричну добротність. Встановлено закономірності впливу товщини та температури на ці характеристики.

Загалом структура роботи є логічною, послідовною і забезпечує цілісне розкриття теми дослідження.

Обґрунтованість наукових положень, висновків та рекомендацій

Наукові результати дисертаційної роботи є добре обґрунтованими та базуються на використанні апробованих методів теоретичної фізики, зокрема теорії пружності, квантової статистики та фізики твердого тіла. Основні результати, отримані здобувачем та винесені на захист, цілком відповідають меті та завданням роботи, обговорювались на наукових семінарах, міжнародних конференціях та опубліковані у фахових виданнях України та зарубіжних виданнях, проіндексованих у базах даних Web of Science Core Collection та/або Scopus. Достовірність отриманих результатів підтверджується узгодженням із відомими теоретичними даними, а також використанням аналітичних підходів у поєднанні з комп'ютерним моделюванням. Під час виконання дисертаційного дослідження було проаналізовано велику кількість наукової літератури (179 посилань).

Наукова новизна

Дисертаційна робота Луцюка Ю.В. містить низку нових наукових результатів, що суттєво розширюють сучасні уявлення про фізику фононних процесів у квазідвовимірних кристалічних структурах. У роботі вперше отримано аналітичні вирази для опису дисперсійних залежностей частот і

групових швидкостей акустичних фононів у наноплівках гексагональної симетрії в межах континуумної моделі. Запропонований підхід дозволяє здійснювати системний аналіз фононного спектра без використання виключно чисельних методів і забезпечує узгодження з відомими результатами інших авторів.

Встановлено нелінійний характер залежності енергетичних характеристик акустичних фононів від геометричних параметрів наноплівок, зокрема їх товщини, а також від температури. Показано, що ефекти просторового обмеження істотно впливають на дисперсію фононів і проявляються найбільш виражено в ультратонких структурах.

Вперше проведено комплексний аналіз температурних залежностей групових швидкостей акустичних фононів різних поляризацій (shear, SA, AS) у наноплівках типу 2H-PbI_2 . Показано, що зміна товщини та температури дозволяє керувати швидкостями поширення фононів у широких межах, причому характер цих змін є суттєво нелінійним. Отримано нові результати щодо ролі різних поляризацій акустичних фононів у формуванні термодинамічних характеристик наноструктур. Встановлено, що поперечні моди (зсуву та згину) роблять домінуючий внесок у теплоємність, ентропію та вільну енергію, тоді як внесок поздовжніх мод є істотно меншим.

Показано, що у формуванні транспортних характеристик, зокрема коефіцієнтів теплопровідності та термодифузії, визначальну роль відіграють поздовжні акустичні фонони, що відображає різну фізичну природу термодинамічних і транспортних процесів у наноструктурах.

Здійснено оцінку термоелектричної добротності наноплівок PbI_2 різної товщини та обґрунтовано можливість їх використання як ефективних термоелектричних матеріалів у діапазоні кімнатних і підвищених температур.

Практичне значення

Результати дисертаційної роботи мають прикладне значення та можуть бути використані при розробці та оптимізації функціональних матеріалів і пристроїв на основі квазідвовимірних кристалічних структур.

Отримані теоретичні результати щодо закономірностей формування фононного спектра та пов'язаних з ним теплофізичних і транспортних процесів створюють підґрунтя для практичного проектування матеріалів із заданими характеристиками теплопереносу та ефективністю термоелектричного перетворення енергії. Виявлені закономірності формування молярної теплоємності, теплопровідності, термодифузії та термоелектричної добротності можуть бути безпосередньо використані при створенні енергоефективних матеріалів і пристроїв нового покоління, зокрема термоелектричних перетворювачів енергії та систем з керованими тепловими потоками.

Зауваження

У процесі ознайомлення з дисертацією у мене виникли деякі запитання й зауваження, які наведено нижче:

1. У роботі (зокрема в табл. 2.1) доцільно більш детально прокоментувати зміну відношення величин $\hbar\omega_n^{sh}:\hbar\omega_n^{as}$.
2. При аналізі результатів, представлених на рисунках розділу 2, зокрема рис. 2.18, залежність $\hbar\omega(d)$ наведена для значення хвильового вектора $q = 0,69 \text{ нм}^{-1}$, тоді як на аналогічних рисунках для матеріалів GaN та AlN використано значення $q = 0,98 \text{ нм}^{-1}$. Така відмінність у виборі параметрів потребує додаткового обґрунтування або пояснення для забезпечення коректності порівняння отриманих результатів.
3. У ряді графічних матеріалів (рис. 2.18, рис. 2.20, рис. 2.22) не позначені величини відкладені по осях координат.
4. У роботі (зокрема на стор. 123) концентрація домішок подана в одиницях см^{-2} , тоді як для об'ємних характеристик зазвичай використовуються одиниці см^{-3} . Такий вибір розмірності потребує додаткового пояснення з урахуванням особливостей розглянутої моделі.
5. Робота не позбавлена стилістичних та орфографічних огріхів.

Зазначені зауваження не впливають на висновок про високий науковий рівень дисертаційного дослідження та його загальну позитивну оцінку.

Повнота викладу в опублікованих працях наукових положень, висновків та рекомендацій

Результати дослідження опубліковано в 6 наукових статтях, індексованих у наукометричних базах даних Scopus та/або Web of Science Core Collection, а також апробовано на 5 вітчизняних і міжнародних наукових конференціях із публікацією тез доповідей. У публікаціях висвітлено матеріали досліджень, що охоплюють усі розділи дисертації.

Відсутність академічного плагіату, фабрикації, фальсифікації

Представлені в наукових працях і дисертації результати дослідження є новими та повністю відповідають принципам академічної доброчесності. Дисертант чітко окреслив свій особистий внесок у публікаціях. Використані в дисертаційній роботі ідеї, теоретичні підходи, методи, а також експериментальні та теоретичні результати інших авторів належним чином задокументовані із відповідними посиланнями на джерела.

Загальний висновок

Дисертаційна робота Луцюка Ю.В. є завершеним науковим дослідженням, виконаним автором самостійно на високому науковому рівні. У роботі одержано низку нових результатів, які є достовірними, науково обґрунтованими та становлять значний науковий і практичний інтерес. Матеріал дисертації викладено послідовно та логічно, він супроводжується значною кількістю табличних і графічних матеріалів, що наочно відображають результати проведених досліджень. Проведений аналіз отриманих даних дозволяє глибоко розкрити сутність досліджуваних фізичних явищ і процесів, що сприяє кращому розумінню предмета дослідження. Сформульовані висновки є обґрунтованими, логічно впливають із отриманих результатів та мають достатню теоретичну аргументацію.

Дисертаційна робота Луцюка Юрія Віталійовича «Вплив просторових обмежень акустичних фононів на термодинамічні та термоелектричні властивості наноплівки гексагональної структури» подана на здобуття наукового ступеня доктора філософії у галузі знань 10 – Природничі науки за

спеціальністю 104 – фізика та астрономія за її актуальністю, науково-теоретичним рівнем, новизною постановки та розв'язання проблеми, практичним значенням отриманих результатів, системністю викладення відповідає вимогам пунктів 6, 7, 8, 9 «Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії» затвердженого Постановою Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022р. №44 (зі змінами, внесеними згідно з Постановою КМУ № 341 від 21.03.2022, № 502 від 19.05.2023, № 507 від 03.05.2024)

Автор дисертації, Луцюк Юрій Віталійович, заслуговує на присудження ступеня доктора філософії з галузі знань 10 – «Природничі науки» за спеціальністю 104 – «фізика та астрономія».

Офіційний рецензент

кандидат фізико-математичних наук,
доцент кафедри електроніки і енергетики
Чернівецького національного університету
імені Юрія Федьковича



Іван КОЗЯРСЬКИЙ

