

Голові разової спеціалізованої  
Вченої ради PhD 13239  
Чернівецького національного  
університету  
імені Юрія Федьковича  
доктору фізико-математичних наук,  
професору Олександру МАХАНЦЮ

## **ВІДГУК**

офіційного опонента на дисертаційну роботу аспіранта

**Юрія Віталійовича ЛУЦЮКА**

*«Вплив просторових обмежень акустичних фононів на термодинамічні та термоелектричні властивості наноплівки гексагональної структури»,*  
подану на здобуття ступеня доктора філософії з галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія»

### **Актуальність дисертаційного дослідження**

Дослідження фізичних властивостей 2D-матеріалів є важливою задачею, що виливає з проблем, пов'язаних зі створенням пристроїв нового покоління – наноелектронних сенсорів, датчиків, елементів оптико- і фотоелектроніки, комірок пам'яті та інших. Можливість їх створення виникла як наслідок розвитку новітніх технологій їх синтезу низьковимірних матеріалів. Зокрема, протягом майже трьох останніх десятиліть було синтезовано велику кількість різноманітних двовимірних функціональних матеріалів і з кожним роком їх перелік збільшується. Встановлено, що фізичні та фізико-хімічні властивості таких матеріалів суттєво відрізняються від традиційних – тривимірних матеріалів. Усвідомлення процесів, що формують відповідні властивості потребує активізації експериментальних і теоретичних досліджень у цій галузі.

Попри значну кількість як експериментальних, так і теоретичних досліджень фізичних властивостей двовимірних матеріалів, на даний час актуальною залишається проблема адекватного теоретичного опису динаміки та взаємодії квазічастинок у них, а також ролі цих взаємодій у процесах, пов'язаних з явищами взаємодії квазічастинок у двовимірних наноструктурах, перспективних для їх використання при створенні новітніх функціональних пристроїв наноелектроніки.

## **Аналіз змісту дисертації та основних її результатів**

Тематика дисертаційного дослідження Ю.В. Луцюка присвячена створенню адекватних методів дослідження структури фононного спектра системи акустичних фононів у двовимірних кристалічних структурах, а тому є актуальною з огляду розуміння цілісної картини фізики теплових і термоелектричних явищ у нанорозмірних структурах.

Роботу виконано на кафедрі професійної та технологічної освіти і загальної фізики Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича відповідно до програми наукової тематики «Статичні та кінетичні явища у макро- і нанооб'єктах зі спіновими переходами та металополімерних системах, динаміка квазічастинок у низьковимірних кристалічних структурах» (№ держреєстрації 0122U001981).

Дисертація складається з анотації українською і англійською мовами, вступу та чотирьох розділів, а також висновків, переліку використаних джерел та додатків.

Написаний доброю українською мовою текст дисертації висвітлює результати авторського дослідження трансформації станів кожної з гілок акустичних фононів у плоских квазідвовимірних нанорозмірних кристалічних структурах (наноплівках) гексагональної симетрії під час зміни їхньої товщини та впливу таких змін на термодинамічні та термоелектричні властивості таких структур. Зокрема, досліджено вплив просторових обмежень та зміни температури на теплові (теплоємність, теплопровідність, термодифузія тощо), термодинамічні (ентропія, вільна енергія Гельмгольца) та термоелектричні (термоелектрична добротність) характеристики наноплівок дийодиду свинцю різної товщини.

З цією метою дисертантом запропонований підхід до теоретичного опису фононних станів у наноплівках, що ґрунтується на уявленнях та постулатах теорії пружності, квантової статистики та фізики твердого тіла. Конкретні результати виконані на основі аналітичних методів, так і методами комп'ютерного моделювання. Зокрема розроблено аналітичний спосіб розрахунку дисперсійних залежностей частот і групових швидкостей акустичних фононів у наноплівках гексагональної симетрії та простежено їхні зміни, викликані зміною товщини плівки.

У вступі обґрунтовано вибір і актуальність теми дисертаційного дослідження; вказано його зв'язок з тематикою наукових досліджень кафедри, на якій воно здійснювалося; окреслено науковий апарат дослідження –

сформульовано його мету та завдання, вказані об'єкт, предмет і використані методи, зазначені наукова новизна та практичне значення отриманих результатів; подано інформацію про публікації за темою дослідження з висвітленням особистого внеску здобувача у кожній з них, а також ступінь апробації результатів, структуру й обсяг дисертації.

У *першому розділі* дисертант здійснив детальний аналіз і узагальнив результати наукових праць, присвячених класифікації низьковимірних, головню дво- та квазідвовимірних, кристалічних структур, способам їх одержання, особливостям їхньої кристалічної будови та пружних властивостей. Висвітлено також можливості їх застосування. Особливу увагу приділено методам теоретичного дослідження явищ, вивчення яких становить предмет дисертації.

У *другому розділі* висвітлено запропоновану дисертантом методику аналітичного дослідження частотного спектра акустичних фононів у наноплівках гексагональної симетрії. Отримано аналітичні співвідношення для опису дисперсії частот і групових швидкостей кожної з гілок спектра акустичних фононів – хвиль зсуву, дилатаційної та флексуральної мод; встановлено характер їх трансформації при зміні товщини плівки. Показано, що із зменшенням товщини наноплівки групові швидкості усіх типів акустичних фононів у ній спадають за нелінійним законом і тим сильніше, чим тонша плівка.

*Третій розділ* розкриває результати дослідження ролі складових спектра акустичних фононів у формуванні теплових і термодинамічних властивостей наноплівок  $2H-PbI_2$  різної товщини. З використанням отриманих законів дисперсії частот здійснено комп'ютерне моделювання температурних залежностей теплоємності, ентропії та вільної енергії таких наноструктур і проаналізовано парціальні внески окремих гілок спектра акустичних фононів у значення кожної з цих величин. Встановлено, що фонони різної поляризації по-різному впливають на термодинамічні характеристики наноплівки, а ступінь такого впливу істотно залежить від її товщини та температури. Показано, що парціальні внески поперечних складових фононного спектра у значення указаних функцій є найбільшими у наноплівках будь-якої товщини.

*Четвертий розділ* присвячений дослідженню ролі складових спектра акустичних фононів у формуванні значень кількісних характеристик динаміки термічно стимульованих транспортних і термоелектричних процесів у наноплівках дийодиду свинцю. Зокрема, досліджені температурні залежності середніх швидкостей фононів кожної поляризації, коефіцієнтів ґраткової

теплопровідності та термодифузії; визначені парціальні внески кожної фононної гілки до сумарних значень цих величин та встановлено закономірності їх зміни зі зміною товщини наноплівки. На основі одержаних результатів оцінено термоелектричну добротність та обґрунтовано перспективність застосування ультратонких наноплівок  $2\text{H-PbI}_2$  у якості термоелектричного матеріалу.

### **Наукова новизна теоретичних результатів, оцінка обґрунтованості наукових положень і висновків, наведених у дисертації**

На мою думку, наукова новизна теоретичних результатів, представлених у дисертації Луцюка Ю.В. полягає у тому, що ним вперше:

- Запропонований аналітичний підхід до встановлення явного виду законів дисперсії частот кожної з гілок спектру акустичних фононів у квайдвовимірній кристалічній структурі. Це дало змогу дослідити залежності енергій і групових швидкостей акустичних фононів усіх можливих поляризацій від товщини наноплівки та температури у наноплівках структури вюртциту типу GaN, AlN та  $2\text{H-PbI}_2$ . Показано, що залежності цих величин як від довжини хвильового вектора фонона, так і від товщини наноплівки нелінійні. Залежність енергії фонона від товщини наноплівки виявляється найбільш суттєвою у надтонких структурах, що узгоджується з даними інших незалежних досліджень.

- Продемонстрована можливість моделювання у рамках єдиного підходу поведінки характеристик широкого спектру термофізичних властивостей (швидкості поширення, теплоємності, ентропії, потенціалу Гельмгольца, коефіцієнтів теплопровідності та термодифузії) квайдвовимірних систем при зміні зовнішніх умов – товщини та температури.

- Здійснено кількісну оцінку перспективності використання наноплівок  $2\text{H-PbI}_2$  різної товщини у якості термоелектричного матеріалу. Показано, що термоелектрична добротність ультратонких наноплівок може сягати величин, достатніх для очікування можливості їх використання для створення термоелектричних пристроїв, призначених для роботи в діапазоні кімнатних і вище температур.

Наукові положення і висновки, сформульовані у тексті дисертації, достатньо обґрунтовані та належно висвітлені у відповідних її розділах. Усі отримані здобувачем та включені у дисертацію результати відповідають меті та завданням роботи, а також належно апробовані – доповідалися на фахових вітчизняних і міжнародних конференціях і опубліковані у фахових виданнях, у т.ч. й індексованих у базах даних Scopus.

Достовірність отриманих результатів і висновків обґрунтована застосуванням добре апробованих методів фізики твердого тіла: теорія пружності для встановлення дисперсійних залежностей частот акустичних фононів, модель Дебая-Каллауея і правило Матіссена – для дослідження процесів розсіювання фононів, методи квантової статистики – для встановлення температурних залежностей термодинамічних величин, закону Відемана-Франца-Лоренца, а також їх узгодженням з відомими результатами теоретичних розрахунків та експериментальних вимірювань, виконаних авторами інших незалежних досліджень.

Дисертаційна робота Ю.В. Луцюка характеризується логічно побудованою структурою, майстерним висвітленням мети, змісту кожного з етапів дослідження та інтерпретації отриманих результатів. Дисертантом опрацьована досить велика кількість публікацій у фахових вітчизняних та іноземних виданнях, відображених у списку використаних джерел, що дає змогу оцінити як адекватність мети дослідження і підходів для її досягнення, так і достовірність отриманих результатів.

### **Теоретичне та практичне значення одержаних результатів**

Обговорюване тут дослідження є теоретичним, основний наголос в якому зроблено на створенні підходу, зручного для комп'ютерного моделювання відомих фізичних явищ у складних для аналізу традиційними кристалічних структурах – наноплівках шаруватих кристалів. На мою думку, саме це визначає теоретичну цінність його результатів.

Щодо практичного значення результатів, то я погоджуюся з його оцінкою дисертантом – вони можуть виявитися корисними для визначення параметрів створюваних електронних пристроїв на основі матеріалів, до складу яких входять плоскі шари  $2\text{H-PbI}_2$  нанометрової товщини, та оптимальних умов їх ефективної експлуатації.

### **Повнота викладу матеріалів у роботах, які опубліковані автором**

Результати дисертації у повній мірі опубліковані в 11 наукових працях. Серед них 3 статті у наукових виданнях, включених до переліку фахових видань України (одна – з категорії Б, дві інших – проіндексовані у наукометричній базі даних Scopus). Ще три статті опубліковані у періодичних наукових виданнях, проіндексованих у наукометричній базі даних Scopus. Матеріали дисертації доповідалися на 5 наукових конференціях (3 з яких – міжнародні), за результатами яких опубліковано 5 тез доповідей. Основні результати, висвітлені у дисертації, відповідають її темі, завдання дослідження

виконані повністю і на достатньо високому науковому рівні. Це свідчить про те, що дисертаційна робота є самостійним завершеним науковим дослідженням, результати якого мають важливе значення для розвитку послідовної теорії фізичних властивостей нанорозмірних 2D-структур.

### **Зауваження, запитання і побажання**

1. На мою думку, дисертація перевантажена рисунками, що ілюструють однотипні результати, отримані для прикладах наноплівки з трьох різних матеріалів – GaN, AlN і PbI<sub>2</sub>. Мало би зміст зменшити їх кількість, об'єднавши результати дослідження залежностей одного типу, одержаних на прикладі кожної з використаних моделей наноплівки.

2. Означені у назві теми дисертації властивості досліджувалися з використанням аналітичних функцій, що апроксимують дисперсійні залежності частот і групових швидкостей акустичних фононів у наноплівках, явний вид яких встановлений дисертантом у рамках моделі вільної наноплівки (з нульовим навантаженням на її поверхні). Якщо у випадку наноплівки диїодиду свинцю наведене обґрунтування вибору такої моделі, то для наноплівки GaN і AlN воно відсутнє, хоча правомірність його застосування тут неочевидна.

3. На стор. 82 зазначено: «... із зменшенням товщини наноплівки групові швидкості усіх типів акустичних фононів у ній спадають за нелінійним законом ...», тоді як це суперечить результатам, показаним на рис. 2.38 і 2.34, де залежність  $v_n(d)$  явно немонотонна. Це твердження відображено також і у загальних висновках (висновок 3). На мою думку, ця розбіжність потребує додаткового пояснення.

4. У четвертому розділі досліджено коефіцієнт теплопровідності та термоелектричну добротність наноплівки 2H-PbI<sub>2</sub> з урахуванням різних механізмів розсіяння фононів, зокрема Umklapp-процесів та розсіяння на межах. Водночас у роботі практично немає порівняння з експериментальними даними щодо ролі дефектів кристалічної ґратки та домішкових центрів у формуванні механізмів фононного розсіяння і зміні деформаційних мод. Врахування таких факторів могло б зробити запропоновану модель ближчою до реальних низьковимірних систем.

5. З графіків залежностей групових швидкостей флексуральних фононів від хвильового вектора (рис. 2.25, 2.31) і товщини наноплівки (рис. 2.28 і 2.34) видно, що вони можуть перевищувати величину швидкості поширення цього типу фононів у масивному кристалі. Вважаю, що причина такої особливості,

обговореної як у тексті дисертації, так і у відповідних публікаціях, мала би мати більш ґрунтовне пояснення.

6. В описі обґрунтованості та достовірності отриманих результатів, а також під час постановки задачі 4-го розділу, дисертант наводить закон Відемана-Франца-Лоренца для встановлення температурних залежностей термодинамічних величин. Однак, цей закон стосується електронної складової теплопровідності, а у роботі аналізується характер ґраткових (фононних) складових. Можливо, варто було б наголосити і на температурній динаміці електронної складової.

Зазначу, що наведені мною зауваження не впливають на висновок про в цілому високий науковий рівень дисертаційного дослідження та його загальну позитивну оцінку.

### **Загальний висновок**

Представлена дисертаційна робота є завершеним самостійним науковим дослідженням, виконаним на достатньо високому теоретичному рівні. Застосовані методи і апарат теоретичного дослідження аргументовані, а сформульовані висновки у достатній мірі обґрунтовані.

Текст дисертації написаний українською мовою, її зміст викладено в логічній послідовності з достатньою кількістю табличних та графічних даних, що детально ілюструють результати проведених досліджень. Наведений у ній аналіз результатів дослідження достатньо повно й адекватно розкриває їх сутність, що сприяє поглибленню наявних уявлень про закономірності перебігу фізичних явищ і процесів у нанорозмірних кристалічних структурах.

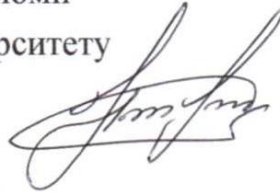
З огляду на викладене вище, можна стверджувати, що дисертаційна робота Луцюка Юрія Віталійовича «Вплив просторових обмежень акустичних фононів на термодинамічні та термоелектричні властивості наноплівки гексагональної структури», подана на здобуття наукового ступеня доктора філософії у галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія» за її актуальністю, новизною постановки, науково-теоретичним рівнем, методологією пошуку розв'язку поставлених задач, 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 2022 р. № 44 (із змінами,

внесеними згідно з Постановою Кабінету Міністрів України № 431 від 21.03.2022 р., № 502 від 19.05.2023 та № 507 від 03.05.2024).

Вважаю, що Луцок Юрій Віталійович заслуговує на присудження йому ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 – «Фізика та астрономія» в галузі знань 10 – «Природничі науки».

Офіційний опонент:

кандидат фізико-математичних наук, професор,  
завідувач кафедри фізики та астрономії  
Карпатського національного університету  
імені Василя Стефаника



Любомир НИКИРУЙ



*С. Никируй засвідчую  
автентичність  
22.05.2026 р.*