

ВИСНОВОК

**про наукову новизну, теоретичне і практичне значення
результатів дисертації Луцюка Юрія Віталійовича
«Вплив просторових обмежень акустичних фононів
на термодинамічні та термоелектричні властивості наноплівки
гексагональної структури»,
поданої на здобуття ступеня доктора філософії
за спеціальністю 104 – Фізика та астрономія
в галузі знань 10 - Природничі науки**

**1. Обґрунтування вибору теми дослідження та її зв'язок із
планами наукових робіт Університету.**

Дослідження фізичних властивостей низьковимірних кристалічних структур, зокрема квазідвовимірних наноплівок, є одним із актуальних напрямів сучасної фізики твердого тіла. Особливий інтерес до таких систем зумовлений наявністю просторових обмежень, які істотно змінюють спектри елементарних збуджень, зокрема акустичних фононів, та визначають теплофізичні, термодинамічні й транспортні властивості матеріалів. Це відкриває широкі можливості для керування властивостями матеріалів на нанорівні та можливого використання їх у наноелектроніці, оптоелектроніці та термоелектричних пристроях.

Незважаючи на значну кількість досліджень у цій галузі, на сьогоднішній день залишається недостатньо розробленим теоретичний опис впливу просторових обмежень на характеристики акустичних фононів та їхню роль у формуванні термодинамічних і теплофізичних властивостей квазідвовимірних систем гексагональної симетрії. Зокрема, актуальним є створення аналітичних підходів, які дозволяють встановити взаємозв'язок між геометричними параметрами наноструктур, спектральними характеристиками фононів і макроскопічними властивостями матеріалів.

Актуальність теми дисертаційної роботи зумовлена необхідністю розроблення узагальненого теоретичного підходу до опису спектра акустичних фононів у наноплівках гексагональної структури та встановлення закономірностей їх впливу на теплофізичні і термоелектричні характеристики таких систем, що має важливе значення як для фундаментальної науки, так і для практичних застосувань.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами та темами.

Дисертаційна робота виконана відповідно до наукової тематики кафедри професійної та технологічної освіти і загальної фізики Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича «Статичні та кінетичні явища у макро- і нанооб'єктах зі спіновими переходами та металополімерних системах, динаміка квазічастинок у низьковимірних кристалічних структурах» (№ державної реєстрації 0122U001981), у межах якої виконувались дослідження, пов'язані з динамікою квазічастинок та теплофізичними процесами у наноструктурах.

Метою роботи є створення узагальненого теоретичного підходу до аналізу теплофізичних властивостей квазідвовимірних кристалічних структур з урахуванням впливу просторових обмежень на характеристики акустичних фононів.

Методи дослідження.

У роботі використано комплекс теоретичних методів фізики твердого тіла. Для опису спектра акустичних фононів та встановлення дисперсійних залежностей застосовано підходи теорії пружності у наближенні пружного континууму. Аналіз термодинамічних характеристик і температурних залежностей фізичних величин здійснено з використанням методів квантової статистики. Для дослідження процесів теплопереносу та оцінювання теплофізичних і термоелектричних параметрів використано відповідні моделі теорії твердого тіла. Чисельні розрахунки та візуалізація отриманих результатів виконані методами комп'ютерного моделювання.

Предметом дослідження є закономірності впливу просторового обмеження акустичних фононів на характеристики термодинамічних і термоелектричних властивостей плоских квазідвовимірних структур (наноплівки) з гексагональною симетрією кристалічної ґратки.

Об'єктом дослідження є теплові явища у квазідвовимірних кристалічних структурах.

2. Формулювання наукового завдання, нове розв'язання якого отримано в дисертації.

У дисертаційній роботі досліджуються процеси поширення та взаємодії акустичних фононів у квазідвовимірних кристалічних структурах гексагональної симетрії, а також їх вплив на формування термодинамічних, теплофізичних і термоелектричних властивостей наноплівок.

Актуальність поставленої задачі зумовлена необхідністю створення адекватного теоретичного опису фононного спектра в умовах просторового обмеження, що є визначальним для розуміння механізмів теплопереносу та формування фізичних властивостей низьковимірних систем.

У роботі розв'язано наукове завдання, яке полягає у розробленні теоретичного підходу до дослідження спектральних характеристик акустичних фононів у квазідвовимірних наноструктурах та встановленні закономірностей їх впливу на макроскопічні фізичні властивості таких систем.

Для досягнення поставленої мети в дисертації сформульовано та вирішено такі основні наукові завдання:

1. Узагальнити наявну в наукових джерелах інформацію щодо особливостей процесів поширення акустичних коливань у двовимірних кристалічних структурах та методів розрахунку їхніх характеристик.
2. Розробити алгоритм дослідження трансформації спектрів частот і групових швидкостей акустичних фононів у наноплівках внаслідок

зміни їхньої товщини.

3. Дослідити залежності швидкостей поширення складових спектра акустичних фононів у наноплівках дийодиду свинцю від їхньої товщини та температури.
4. Визначити роль кожної з гілок спектра акустичних фононів у формуванні величин теплоємності, ентропії та вільної енергії Гельмгольца наноплівки $2H\text{-PbI}_2$, а також дослідити зміни цих величин при змінах її товщини і температури.
5. Обчислити парціальні внески кожної з гілок спектра акустичних фононів у значення коефіцієнтів ґраткової теплопровідності та термодифузії наноплівок $2H\text{-PbI}_2$ різної товщини, а також дослідити температурні зміни цих величин.
6. Оцінити придатність наноплівок $2H\text{-PbI}_2$ до їх використання в якості термоелектричного матеріалу.

3. Наукові положення, розроблені особисто дисертантом, та їх новизна.

У результаті проведених досліджень дисертантом отримано такі нові наукові положення:

1. Теоретичні дослідження спектрів акустичних фононів у квазідвовимірних кристалічних структурах здійснювались у наближенні пружного континууму з використанням методів теорії пружності. Розв'язки рівнянь отримано переважно методом скінченних різниць, що дало змогу отримати числові значення частот і групових швидкостей для дослідження фононного спектра таких структур. Отримані таким чином результати свідчать про суттєве уповільнення акустичних фононів у наноструктурах порівняно з масивними кристалами. Показано, що у випадку моношарового дийодиду свинцю це є причиною аномально низької його теплопровідності та підставою для припущення про його виняткові термоелектричні властивості.

Проте, аналогічні дослідження властивостей наноплівки дийодиду свинцю більшої товщини на даний час відсутні у науковій літературі.

2. Запропоновано метод дослідження спектрів частот і групових швидкостей акустичних фононів у плоских квазідвовимірних кристалічних структурах (наноплівках), що базується на розвиненні амплітуд компонентів вектора зміщення атомів у ряд Фур'є. Це дало змогу отримати аналітичні вирази для частот і групових швидкостей у наноплівках гексагональної симетрії будь-якої товщини.
3. Отримані аналітичні вирази для дисперсійних залежностей частот і групових швидкостей акустичних фононів використані для дослідження температурних залежностей швидкостей поширення складових спектра акустичних фононів у наноплівках 2H-PbI_2 та їхніх змін із зміною товщини плівки та температури. Показано, що при зменшенні товщини швидкості поширення усіх типів акустичних фононів, обмежених у наноплівці – дилатаційних (SA-поляризація), флексуральних (AS-поляризація) та хвиль зсуву (shear-поляризація) нелінійно спадають. Збільшення температури спричиняє зростання цих величин. Швидкість таких змін найбільша в області низьких температур (приблизно до 100 К, залежно від товщини наноплівки) і нелінійно зростає при збільшенні товщини. Це пояснюється розрідженням фононного спектра зі зменшенням товщини наноплівки та зростанням заселеності станів при її нагріванні.
4. Визначена роль кожної з гілок спектра акустичних фононів у формуванні термодинамічних функцій наноплівки 2H-PbI_2 (молярної теплоємності, ентропії та вільної енергії Гельмгольца), а також коефіцієнта термодифузії. Показано, що їхні термодинамічні властивості визначаються переважно фононами поперечної (shear- та AS-поляризації), перші з яких дають дещо більший внесок у значення молярної теплоємності, ентропії та вільної енергії Гельмгольца, а

кожна з них – у рази більший (величина залежить від виду функції), ніж дилатаційні фонони.

5. Досліджена роль кожної з гілок спектра акустичних фононів у процесах теплопровідності та термодифузії у наноплівках $2H-PbI_2$. Обчислені їхні парціальні внески у значення коефіцієнтів теплопровідності та термодифузії наноплівок $2H-PbI_2$ різної товщини при різних значеннях температури. Показано, що домінуюча роль у формуванні цих величин належить дилатаційним фононам. Залежно від температури в ультратонких плівках їх внесок до величини коефіцієнта ґраткової теплопровідності може перевищувати парціальні внески флексуральних фононів у 2,6...3,8 разів, а хвиль зсуву – у 10...27,5 рази.

Величина коефіцієнта ґраткової теплопровідності наноплівок $2H-PbI_2$ зменшується при збільшенні температури за нелінійним законом – стрімко в області кімнатної і нижчих, але істотно повільніше при більш високих температурах. Швидкість зміни також нелінійно змінюється і при змінах товщини наноплівки. Так, при збільшенні температури від 200 до 500 К в ультратонких (до 5 нм) наноплівках його величина зменшується у 4, а при більших значеннях товщини – майже у 6 разів. При температурах понад 500 К коефіцієнт ґраткової теплопровідності, як і швидкості поширення фононів, практично не змінюються, набуваючи значень тим менших, чим тонша плівка.

6. Застосована методика обчислення термодинамічних і термоелектричних характеристик дала змогу оцінити термоелектричну добротність наноплівок $2H-PbI_2$ довільної товщини. Показано, що придатними для створення термоелектричних пристроїв можуть бути наноплівки дийодиду свинцю не лише моношарової, але й більшої товщини, оскільки величина термодинамічної добротності наноплівок товщиною у 2 (6) шарових пакетів $2H-PbI_2$ з домішками донорного

типу помірної концентрації ($1,9 \cdot 10^{12}$ на 1 см^2 шарового пакета) оцінюється, відповідно величиною 1,43 (0,97) при температурі 400 К та 2,36 (1,68) – при 500 К.

Отримані наукові результати є новими, теоретично обґрунтованими та розширюють сучасні уявлення про фізичні процеси у квазідвовимірних кристалічних структурах.

4. Обґрунтованість і достовірність наукових положень, висновків і рекомендацій, які захищаються.

Обґрунтованість і достовірність наукових положень, висновків і рекомендацій, сформульованих у дисертаційній роботі, забезпечуються використанням апробованих теоретичних підходів сучасної фізики твердого тіла, зокрема теорії пружності, методів квантової статистики та аналітичних і чисельних методів дослідження властивостей низьковимірних систем.

При побудові теоретичної моделі використано узагальнення відомих фізичних підходів до опису спектра акустичних фононів у кристалічних структурах із урахуванням просторових обмежень, що дозволило отримати аналітичні залежності, узгоджені з фізичною природою досліджуваних процесів.

Достовірність одержаних результатів підтверджується:

- внутрішньою узгодженістю отриманих аналітичних залежностей і результатів чисельного моделювання;
- коректністю використаних вихідних припущень та граничних умов;
- відповідністю отриманих результатів загальновідомим фізичним закономірностям та їх узгодженням з результатами теоретичних і експериментальних досліджень інших авторів;
- відтворюваністю результатів при зміні параметрів моделі та використанні різних чисельних підходів.

Обґрунтованість висновків також підтверджується системним аналізом отриманих результатів, який охоплює як мікроскопічний рівень (характеристики фононного спектра), так і макроскопічні фізичні величини (теплофізичні та термоелектричні параметри), що забезпечує їх взаємну узгодженість.

Таким чином, отримані в дисертації наукові результати є достовірними, науково обґрунтованими та можуть бути використані для подальших теоретичних та експериментальних досліджень і прикладних застосувань.

Дисертація містить анотації українською та англійською мовами, перелік умовних позначень, вступ, чотири розділи, основні висновки, список використаних джерел та додаток. Дисертаційна робота є самостійною науковою працею. Висновки, рекомендації та пропозиції, що характеризують, зокрема, наукову новизну дослідження, сформовані автором дисертації.

5. Рівень теоретичної підготовки здобувача та рівень його обізнаності з результатами наукових досліджень інших науковців високий. Це видно як з великої кількості наукових джерел, використаних для огляду, так і з опублікованих робіт та доповідей матеріалів дисертації. Здобувач виявив знання фундаментальних дисциплін спеціальності та наукові компетентності, такі як здатність аналізувати та синтезувати інформацію та застосовувати теоретичні знання для вирішення практичних завдань.

6. Наукове та практичне значення роботи.

Дисертаційна робота має важливе наукове та практичне значення, оскільки спрямована на розв'язання актуального наукового завдання у галузі фізики низьковимірних твердотільних систем та розширює сучасні

уявлення про роль акустичних фононів у формуванні властивостей квазідвовимірних кристалічних структур.

Наукове значення одержаних результатів полягає в тому, що:

- **вперше** сформовано узагальнений аналітичний підхід до опису спектральних характеристик акустичних фононів у квазідвовимірних структурах гексагональної симетрії з урахуванням просторових обмежень;
- **удосконалено** теоретичний опис теплофізичних процесів у наноплівках за рахунок врахування парціальних внесків фононних мод різної поляризації;
- **набуло подальшого розвитку** уявлення про механізми формування термодинамічних, теплофізичних і термоелектричних властивостей низьковимірних систем на основі аналізу фононного спектра.

Практичне значення одержаних результатів полягає в тому, що:

- **вперше** обґрунтовано можливість керування теплофізичними та термоелектричними характеристиками наноплівок шляхом зміни їх товщини та температурних умов;
- **удосконалено** підходи до прогнозування теплопровідності, термодифузії та термоелектричної ефективності квазідвовимірних матеріалів;
- **набуло подальшого розвитку** застосування теоретичних моделей для вибору оптимальних параметрів електронних і термоелектричних пристроїв на основі шаруватих напівпровідникових структур, зокрема 2H-PbI₂.

Отримані результати можуть бути використані при розробленні нових функціональних матеріалів наноелектроніки та термоелектрики, а

також у подальших теоретичних і прикладних дослідженнях у галузі фізики наноструктур.

7. Повнота викладу матеріалів дисертації в публікаціях та особистий внесок здобувача в публікації.

Особистий внесок здобувача у вирішенні конкретного наукового завдання є значним. Зокрема:

- здобувачем самостійно сформульовано мету та основні завдання дослідження, обґрунтовано вибір теоретичних підходів і методів їх реалізації;
- розроблено аналітичну модель та виконано математичні викладки для опису спектра частот і групових швидкостей акустичних фононів у квазідвовимірних кристалічних структурах гексагональної симетрії;
- отримано аналітичні залежності, що описують вплив просторових обмежень на енергетичні та кінематичні характеристики акустичних фононів у наноплівках;
- здійснено чисельні розрахунки та комп'ютерне моделювання фононного спектра і пов'язаних з ним фізичних характеристик, а також виконано графічне представлення отриманих результатів;
- проведено аналіз температурних залежностей статистично усереднених швидкостей поширення акустичних фононів різних поляризацій;
- досліджено внесок окремих гілок спектра акустичних фононів у формування термодинамічних, теплофізичних і термоелектричних властивостей наноплівок;
- узагальнено та інтерпретовано отримані результати, сформульовано основні наукові положення та висновки дисертаційної роботи.

Усі основні результати дисертації отримані здобувачем особисто або за його безпосередньої участі. У роботах, виконаних у співавторстві,

здобувачу належить провідна роль у постановці задач, виконанні розрахунків, аналізі результатів та підготовці матеріалів до публікації.

Результати перевірки тексту дисертації з використанням антиплагіатної системи Turnitin показав на 2% схожості з джерелами з Інтернету. Робота відповідає принципам академічної доброчесності.

Основні положення та висновки дисертаційної роботи викладені у 6 наукових публікаціях (3 статті у виданнях, що індексуються в наукометричній базі даних Web of Science Core Collection та/або Scopus, 2 статті у виданнях, що входять до списку наукових фахових видань України та індексуються в наукометричній базі даних Web of Science Core Collection та/або Scopus та 1 стаття у виданнях, включених до переліку фахових видань України). Апробація основних результатів роботи здійснювалася шляхом доповідей на 5 наукових конференціях та публікацією 5 тез доповідей

Наукові праці у виданнях, включених до переліку наукових фахових видань України

1. Луцук Ю. В. Температурні залежності усереднених групових швидкостей акустичних фононів у плоских наноплівках дийодиду свинцю. *Фізика та освітні технології*. 2024. № 2. С. 40–46. DOI: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-6>.

Наукові статті, опубліковані у виданнях, що входять до списку наукових фахових видань України та проіндексованих у наукометричних базах даних Web of Science Core Collection та/або Scopus:

1) Lutsiuk Yu. V., Kramar V. M. Analytical calculation of frequency spectrum and group velocities of acoustic phonons in quasi two dimensional nanostructures. *Journal of Nano- and Electronic Physics*. 2020. Vol. 12. № 5. P. 05033.

DOI: [10.21272/jnep.12\(5\).05033](https://doi.org/10.21272/jnep.12(5).05033)

2. Lutsiuk Yu., Kramar V., Petryk I. Frequency spectrum and group velocities of acoustic phonons in PbI₂ nanofilms. *Physics and Chemistry of Solid State*. 2022. Vol. 23. № 3. P. 478–483.

DOI: <https://doi.org/10.15330/pcss.23.3.478-483>

Наукові статті, опубліковані у періодичних наукових виданнях, проіндексованих у наукометричних базах даних Web of Science Core Collection та/або Scopus :

1) Derevyanchuk A. V., Lutsiuk Yu. V., Kramar V. M. An analytical method for investigations of acoustic phonons spectra in semiconductor ultra-thin flat films. *Proceedings of SPIE, Fourteenth International Conference on Correlation Optics*. 2020. Vol. 11369. P. 113691D.

DOI: <https://doi.org/10.1117/12.2553960>

2. Lutsiuk Yu. V., Kramar V. M., Konstantynovych I. A., Voitsekhivska O. M. Effect of acoustic phonons on thermoelectric properties of lead iodide nanofilms. *Journal of Thermoelectricity*. 2025. № 2. P. 5–16.

DOI: <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2025-2-5-16>

3. Lutsiuk Yu. V., Kramar V. M., Konstantynovych I. A. Role of acoustic phonons in the formation of thermophysical properties of PbI₂ nanofilms. *Journal of Thermoelectricity*. 2025. № 3. P. 5–16.

DOI: <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2025-3-5-17>

8. Апробація матеріалів дисертації здійснювалася на таких конференціях:

1. Луцюк Ю.В., Крамар В.М. Аналітичний розрахунок спектру акустичних фоновів у наноплівках GaN та AlN. *Перспективні напрямки сучасної електроніки, інформаційних і комп'ютерних систем : тези доповідей III Всеукраїнської науково-практичної конференції MEICS–2018 (21–23 листопада 2018 р., м. Дніпро) / уклад. О.В. Іванченко, О.В. Вашерук. Дніпро : Дніпровський нац. ун-т ім. О. Гончара, 2018. С. 166–167.*

2. Lutsiuk Yu.V., Kramar V.M. Analytical calculation of the acoustic phonons spectra and group velocities in quasi-2D nanostructures. *Spectroscopy of Molecules and Crystals : Book of Abstracts of XXIV Galyna Puchkovska International School-Seminar (Odessa, Ukraine, August 25–30, 2019)*. Odesa, 2019. P. 153

3. Lutsiuk Yu.V., Kramar V.M. Influence of spatial confinements on the group velocities of acoustic phonons in PbI₂ nanofilms. *2nd International Research and Practice Conference “Nanoobjects & Nanostructuring” (N&N–2022) : Proceedings (Lviv, Ukraine, September 26–28, 2022) / Ivan Franko National University of Lviv; Shevchenko Scientific Society; eds. O. Reshetnyak, L. Boichyshyn, I. Marchuk. Lviv : Research and Publishing Center of the Shevchenko Scientific Society, 2022. P. 74–75.*

4. Lutsiuk Yu.V. Size-temperature changes of the averaged group velocities of acoustic phonons in PbI₂ nanofilms. *International Research and Practice Conference*

“Nanotechnology and Nanomaterials” (NANO–2024) (Uzhhorod, Ukraine, August 21–24, 2024) / ed. by Dr. Olena Fesenko. Kyiv : Institute of Physics of NAS of Ukraine, 2024. P. 562.

5. Lutsiuk Yu.V., Kramar V.M., Konstantynovych I.A. Role of the acoustic phonon spectrum components in the formation of thermophysical properties of wurtzite-structure nanofilms. *XX Міжнародна Фреїківська конференція з фізики і технології тонких плівок та наносистем*. Матеріали. Івано-Франківськ : Вид-во Карпатського національного університету імені Василя Стефаника, 2025. P. 68.

9. Апробація матеріалів дисертації

Апробація матеріалів дисертації здійснювалася на таких конференціях та семінарах:

- *III Всеукраїнська науково-практична конференція MEICS–2018 (21–23 листопада 2018 р., м. Дніпро),*
- *XXIV Galyna Puchkovska International School-Seminar (Odessa, Ukraine, August 25–30, 2019),*
- *2nd International Research and Practice Conference “Nanoobjects & Nanostructuring” (N&N–2022) (Lviv, Ukraine, September 26–28, 2022),*
- *International Research and Practice Conference “Nanotechnology and Nanomaterials” (NANO–2024) (Uzhhorod, Ukraine, August 21–24, 2024),*
- *Ювілейна XX Міжнародна Фреїківська конференція з фізики і технології тонких плівок та наносистем (ICPTTFN-XX) (Івано-Франківськ, 6-10 жовтня 2025 р.).*

9. Оцінка мови і стилю дисертації.

Мова і стиль дисертації відповідають вимогам, що висуваються до праць такого рівня.

10. Відповідність змісту дисертації спеціальності з відповідної галузі знань, з якої вона подається до захисту.

Зміст дисертації відповідає чинним вимогам до оформлення дисертації, встановленим освітньо-науковою програмою «Фізика та астрономія» галузі знань 10 - Природничі науки, спеціальності 104 - Фізика та астрономія.

11. Дотримання нормативних вимог щодо оформлення дисертації. Нормативні вимоги щодо оформлення дисертації дотримані повністю.

12. Рекомендації дисертації до захисту.

Дисертаційна робота Луцюка Юрія Віталійовича «Вплив просторових обмежень акустичних фононів на термодинамічні та термоелектричні властивості наноплівки гексагональної структури», подана на здобуття 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 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 КМУ від 12.01.2022 р. №44 (зі змінами, внесеними згідно з Постановою КМУ №507 від 03.05.2024 р.).

За результатами публічної презентації результатів дисертації та їх обговорення на відкритому фаховому семінарі кафедри професійної та технологічної освіти і загальної фізики навчально-наукового інституту фізико-технічних та комп'ютерних наук Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича 13 березня 2026 року дисертацію Луцюка Юрія Віталійовича рекомендовано до захисту в разовій спеціалізованій вчентій раді для здобуття ступеня доктора філософії у галузі знань 10 - Природничі науки за спеціальністю 104 - Фізика та астрономія.

Дата: 13 березня 2026 року

Голова засідання,
доктор фізико-математичних наук, професор,
завідувач кафедри професійної та технологічної
освіти і загальної фізики
Чернівецького національного університету
імені Юрія Федьковича

Юрій ГУДИМА

Підпис *Гудима Ю.* засвідчую
Учений секретар Чернівецького національного
університету імені Юрія Федьковича
Сирівська Н.С.
" 13 " 03 2026 р.

