

Рецензія

на дисертаційне дослідження Луцюка Юрія Віталійовича
«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 та її практична цінність

Дослідження впливу просторових обмежень акустичних фононів на термодинамічні та термоелектричні властивості наноплівки гексагональної структури є актуальним напрямом сучасної фізики твердого тіла, фізики низьковимірних систем та нанотехнологій. Стрімкий розвиток наноелектроніки, фотоніки, спінтроніки та термоелектрики дедалі більше ґрунтується на використанні матеріалів із нанометровими розмірами, у яких квантово-розмірні ефекти та явища просторового обмеження суттєво змінюють фізичні характеристики порівняно з об'ємними кристалами.

Особливого значення набуває аналіз акустичних фононних мод у наноплівках, оскільки саме фононна підсистема визначає процеси перенесення тепла та значною мірою впливає на теплоємність, ентропію, вільну енергію, теплопровідність і термоелектричну добротність матеріалів. У нанорозмірних структурах зміна спектра акустичних фононів внаслідок просторового обмеження призводить до істотної модифікації термодинамічних параметрів і механізмів теплопереносу, що відкриває можливості цілеспрямованого керування тепловими та електронними властивостями матеріалів.

Актуальність таких досліджень особливо зростає в умовах подальшої мініатюризації електронних пристроїв та підвищення вимог до енергоефективності сучасних технологій. Перегрів елементів наноелектроніки та необхідність ефективного відведення тепла є одними з головних обмежувальних факторів розвитку наноелектронних систем. У зв'язку з цим вивчення закономірностей зміни теплових характеристик наноплівки залежно від їхньої

товщини, геометрії та кристалічної структури має не лише фундаментальне, а й важливе прикладне значення.

Крім того, значний інтерес до термоелектричних матеріалів зумовлений потребою створення нових джерел енергії та систем рекуперації тепла. Зниження теплопровідності при збереженні високих електричних характеристик є одним із ключових шляхів підвищення термоелектричної ефективності матеріалів. Саме наноструктурування та керування фононним спектром розглядаються сьогодні як перспективні підходи до покращення термоелектричних параметрів. У цьому контексті дослідження наноплівки гексагональної структури є важливими для розвитку сучасних енергозберігаючих технологій та створення функціональних матеріалів нового покоління.

Таким чином, тема дисертаційної роботи є актуальною як з точки зору фундаментальних досліджень фізичних властивостей низьковимірних систем, так і з позицій практичного застосування отриманих результатів у наноелектроніці, термоелектриці та сучасних інформаційних технологіях.

Ступінь обґрунтованості наукових положень, висновків, рекомендацій, сформованих у дисертації

Обґрунтованість наукових положень і висновків дисертаційної роботи забезпечується використанням фундаментальних та апробованих методів теоретичної фізики, зокрема теорії пружності, методів квантової статистики, моделі Дебая–Каллауея та правила Матіссена. Застосовані підходи є коректними та широко використовуються для дослідження термодинамічних і термоелектричних властивостей низьковимірних систем.

Достовірність отриманих результатів підтверджується узгодженням теоретичних розрахунків із відомими експериментальними та теоретичними даними інших авторів, а також фізичною обґрунтованістю отриманих залежностей.

Практичні рекомендації щодо використання наноплівки 2H-PbI_2 як перспективних термоелектричних матеріалів логічно випливають із проведеного

аналізу теплопровідності, термодинамічних функцій і оцінки термоелектричної добротності ZT.

Високий рівень достовірності роботи також підтверджується особистим внеском здобувача у розробку програм для комп'ютерного моделювання та виконання чисельних розрахунків.

При підготовці дисертації Луцюк Ю. В. опрацював велику кількість фахової іноземної та української літератури. Це статті у високореєтингових журналах та книгах, що наведені у списку використаних джерел.

Наукова новизна

У дисертаційній роботі отримано низку нових результатів, що розширюють сучасні уявлення про вплив просторового обмеження акустичних фононів на властивості наноплівки гексагональної структури.

Вперше в наближенні пружного континууму отримано аналітичні вирази для частот і групових швидкостей акустичних фононів різних поляризацій у наноплівках гексагональної симетрії та встановлено їх залежність від товщини плівки і температури.

Досліджено вплив просторового обмеження на термодинамічні та транспортні характеристики наноплівки типу GaN, AlN і PbI₂, зокрема теплоємність, ентропію, теплопровідність і термодифузію. Показано, що найбільш виражені ефекти проявляються в ультратонких структурах.

Вперше виконано аналіз внесків окремих фононних мод у формування термодинамічних і транспортних властивостей наноплівки та здійснено оцінку термоелектричної добротності наноплівки PbI₂, що підтверджує їх перспективність для застосування в термоелектричних пристроях.

Отримані результати мають важливе значення для розвитку фізики низьковимірних систем і створення нових функціональних термоелектричних матеріалів.

Структура і зміст дисертації

Дисертація має чітку логічну структуру, що відповідає вимогам до кваліфікаційних наукових праць. Робота складається зі вступу, чотирьох

розділів, висновків, списку використаних джерел та додатків. Загальний обсяг дисертації становить понад 147 сторінок, що свідчить про ґрунтовність проведеного дослідження.

У вступі обґрунтовано актуальність теми, визначено мету, завдання, об'єкт і предмет дослідження, окреслено методи та зв'язок роботи з науковими програмами кафедри. Подано інформацію про апробацію результатів та особистий внесок здобувача.

Перший розділ містить огляд літератури з проблематики низьковимірних кристалічних структур, їх класифікації, методів синтезу та перспектив застосування у сучасній електроніці й термоелектриці. Особливу увагу приділено акустичним фононам та їх ролі у фізичних процесах наноструктур.

Другий розділ присвячений аналітичному розрахунку спектрів частот і групових швидкостей акустичних фононів у наноплівках гексагональної симетрії. Автор розробив методику аналітичного опису дисперсійних залежностей та показав їх трансформацію зі зміною товщини плівки.

В третьому розділі розглядається вплив акустичних фононів на термодинамічні властивості наноплівок PbI_2 . Досліджено теплоємність, ентропію та вільну енергію, визначено внески окремих гілок спектра у формування цих характеристик.

В четвертому розділі аналізується роль складових спектра акустичних фононів у формуванні транспортних і термоелектричних властивостей наноплівок PbI_2 . Розраховано температурні залежності теплопровідності, термодифузії та термоелектричної добротності, обґрунтовано перспективність використання ультратонких наноплівок як термоелектричного матеріалу.

У висновках узагальнено результати дослідження, сформульовано основні положення наукової новизни та практичного значення роботи.

Список використаних джерел містить 179 джерел і охоплює значний масив сучасної наукової літератури з досліджуваної теми.

Таким чином, структура дисертації є послідовною та логічною, а зміст відповідає заявленій меті й завданням дослідження, що забезпечує цілісність та наукову завершеність роботи.

Повнота викладу матеріалів у роботах, які опубліковані автором

Основні положення і висновки дисертаційної роботи викладені у 6 наукових працях. Зокрема, 5 з них індексовані у Scopus (дві $Q=3$, три $Q=4$). Матеріали дисертації доповідалися на міжнародних наукових конференціях, за результатами яких опубліковано 5 тез доповідей. Опубліковані роботи відображають основні положення дисертації, містять достатньо повний виклад отриманих результатів та підтверджують їх апробацію у науковій спільноті. Це свідчить про належний рівень завершеності дослідження та відповідність його змісту вимогам до кваліфікаційних наукових праць..

Відомості про дотримання академічної доброчесності

У дисертації та наукових публікаціях Луцюка Ю. В. відсутні порушення академічної доброчесності.

Зауваження до дисертації

При ознайомленні з текстом було виявлено ряд недоліків:

1. Використання моделі пружного континууму для плівок, які містять декілька атомних шарів потребує додаткового обґрунтування.
2. При розв'язанні диференціального рівняння використано граничні умови Неймана, що моделює вільну плівку. Цікавим був би випадок, коли плівка закріплена з одного боку, що відповідає ситуації, коли вона напилена на підкладці.
3. Описки та технічні помилки:
 - У переліку умовних позначень (с. 16): термін "Гельмгольція" замість нормативного "Гельмгольца". Також вказано "роділ 3" замість "розділ 3". На с. 47 замість «плівки» написано «плавки».
 - На с. 16, у списку скорочень, аббревіатура DFT розшифрована як "теорія диференціала густини", тоді як загальноприйнятим перекладом є "теорія функціоналу густини" (Density Functional Theory).

- Скорочення sh, SA та AS що позначають різний тип фононів не наведено у списку скорочень.
- У списку опублікованих праць за темою дисертації на с.11 та на с.144 під п.4 та п.5 вказано одну і ту ж саму статтю, хоча DOI у них різні і вказують на різні статті.

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

Загальний висновок

Дисертаційна робота виконана на високому теоретичному рівні, матеріал дисертації викладено в логічній послідовності, він супроводжується великою кількістю табличних та графічних даних, які детально відображають результати проведених досліджень. Аналіз представлених даних глибоко розкриває сутність фізичних явищ та процесів, що, сприяючи більш глибокому розумінню предмету дослідження. Усі сформульовані висновки отримали необхідну і достатню теоретичну аргументацію та є методологічно обґрунтованими.

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

Рецензент

доктор фізико-математичних наук, професор,
професор кафедри термоелектрики та медичної фізики
Чернівецького національного університету
імені Юрія Федьковича

Володимир ГОЛОВАЦЬКИЙ

