

ВИСНОВОК

**про наукову новизну, теоретичне та практичне значення результатів дисертації «Вивчення процесів фазоутворення на межі рідина-кристал в нанокompозитах з металевою матрицею» здобувача ступеня доктора філософії з галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія»
Плечистого Валерія Станіславовича**

1. *Актуальність теми дисертації*

Композити з металевою матрицею є перспективним класом матеріалів, фізичними властивостями яких можна керувати шляхом зміни компонент матричного сплаву, а також наповнювачів. Особливо перспективними в цьому сенсі є композити з нанорозмірними наповнювачами. Проте під час синтезу та практичного використання нанокompозитів виникають проблеми з взаємодією матриці та наповнювача. Тому особливої уваги заслуговують дослідження взаємодії та рівноважного або нерівноважного співіснування наноматеріалів з об'ємною матрицею, що є основою сучасного матеріалознавства композитних матеріалів. Взаємодія та співіснування двох фаз (рідкої та кристалічної) відіграє важливу роль також у випадку вирощування монокристалів та отримання тонких плівок методами епітаксії та інших технологічних процесах.

Стабільність границі між фазами у випадку одно- та багатокомпонентних систем залежить головно від атомного складу та термодинамічних параметрів, які характерні для матеріалу. Проте основною проблемою вивчення наноматеріалів в реальному часі є відсутність прямих експериментальних методик для таких досліджень на атомному рівні. Тому значної популярності у цьому випадку набули методи комп'ютерного моделювання, які дають змогу вивчити як атомну структуру, так і властивості наноматеріалів будь-якої розмірності.

Дана робота стосується вивчення структури та деяких властивостей міжфазної границі в однокомпонентних та двокомпонентних системах методом молекулярної динаміки (МД). Для моделювання застосовували класичний метод МД з використанням пакету LAMMPS. Взаємодію між атомами задавали за допомогою потенціалів отриманих, використовуючи метод зануреного атома або модифікований метод зануреного атома. Результати моделювання аналізували з використанням вже наявних та власних комп'ютерних алгоритмів та програм.

Використовуючи результати моделювання та їхнього аналізу, проведено дослідження структури тонких шарів в області міжфазної границі

досліджених матеріалів з використанням тривимірних та двовимірних парних кореляційних функцій, а також параметрів, отриманих на їхній основі. Аналіз міжфазної границі здійснено з використанням, так званих, профілю атомної густини та атомної концентрації для двокомпонентних систем. Для однокомпонентних матеріалів обчислено поверхневу енергію, а також запропоновано метод обчислення коефіцієнта температуропровідності та теплопровідності.

Тему дисертації затверджено на засіданні Вченої ради Львівського національного університету імені Івана Франка, протокол № 58/11 від 28.11.2018 р.

2. Зв'язок теми дисертації з державними програмами, науковими напрямами університету та кафедри

Дослідження, результати яких представлені в дисертаційній роботі, виконано на кафедрі фізики металів Львівського національного університету імені Івана Франка відповідно до держбюджетних тем: «Нові сплави з аморфними та нанокристалічними фазами для припоїв з широким температурним інтервалом використання» (2019–2021 р.р., № держреєстрації 0119U002204), «Синтез, структура та властивості нанокompозитних матеріалів на основі легких високоентропійних сплавів» (2021-2022 р.р., № держреєстрації 0121U109730), «Оптимізація фізичних властивостей нанокompозитів на основі металевих евтектик для безсвинцевих припоїв» (2022-2023 рр., № держреєстрації 0122U001521)

3. Особистий внесок здобувача в отриманні наукових результатів

Дисертація є самостійною науковою працею, в якій висвітлені власні думки та розробки автора, що дали змогу вирішити поставлені задачі. Зокрема, дисертантом було запропоновано методику моделювання структури та властивостей міжфазової границі метал-кремній та рідина-кристал. Автором дисертації було також запропоновано алгоритми для аналізу результатів моделювання. Дисертант проаналізував процес плавлення границі фаз метал-кремній на основі теорії контактного плавлення. Автор вивчив розподіл атомів на межі двох фаз залежно від співвідношення кількостей атомів металу та кремнію. Дисертант також розробив методику моделювання коефіцієнта теплопровідності матеріалів на меді двох фаз.

Результати досліджень, наведені у дисертаційній роботі та опубліковані у наукових статтях, належать авторові і є його науковим доробком.

4. Достовірність та обґрунтованість отриманих результатів та запропонованих автором вирішень, висновків, рекомендацій

Достовірність та обґрунтованість отриманих в роботі результатів підтверджується апробацією даних на численних міжнародних наукових конференціях та семінарах, а також публікаціями в престижних міжнародних фахових виданнях. Обґрунтованість запропонованих в роботі вирішень забезпечено використанням добре апробованого програмного забезпечення для моделювання методом молекулярної динаміки та сучасних та надійних потенціалів міжатомної взаємодії. Одержані в роботі результати узгоджуються як між собою, так і з відомими теоретичними та експериментальними результатами досліджень інших авторів.

5. Ступінь новизни основних результатів дисертації порівняно з відомими дослідженнями аналогічного характеру

В дисертаційній роботі вперше:

- досліджено структуру поверхні рідких металів (алюміній, мідь, золото) та кремнію використовуючи формалізм поверхневих парних кореляційних функцій та здійснено її порівняння зі структурою об'ємних матеріалів;
- вивчено процес дифузійної взаємодії на межі розділу метал-напівпровідник та встановлено термодинамічні особливості формування рівноважної атомної міжфазної границі;
- на основі аналізу профілів концентрації та густини на границі фаз вивчено кінетику міжфазної взаємодії в системах Au-Si, Cu-Si та Al-Si;
- досліджено кінетику формування кластерів золота на поверхні кремнію залежно від температури та кількості атомів золота;
- вивчено поверхневу енергію, енергію міжфазової взаємодії та коефіцієнт теплопровідності на межі фаз за різних температур.

6. Перелік наукових праць, які відображають основні результати дисертації

6.1. Статті у наукових фахових виданнях України:

1. . I. Shtablavyi, V. Plechystyy, B. Tsizh, S. Mudry, Structure and free volume distribution in Bi-Zn liquid alloys // Journal of Physical Studies. -2020. - V. 24(4). -P. 4601 – 4609. (Особистий внесок здобувача: розробка алгоритму моделювання, моделювання структури розплавів Bi-Zn та розрахунок вільного об'єму, участь у формуванні основних положень та висновків). Видання індексується у наукометричних базах Scopus та Web of Science; квартиль Q4.

2. I. Shtablavyi, O. Kovalskyi, **V. Plechystyy**, Yu. Pashko, S. Mudry. Modification of the atomic structure of liquid $Al_{0.973}Ni_{0.027}$ eutectic alloy by carbon nanotubes // *Фізика і хімія твердого тіла*. -2020. -V. 21(2). -P. 204-210. (Особистий внесок здобувача: синтез зразків, отримання експериментальних результатів, обчислення функцій радіального розподілу атомів та їхній аналіз, участь у формуванні основних положень та висновків).

3. **В. Плечистий**, С. Мудрий, М. Дуфанець, І. Штаблавий. Метод капілярних флуктуацій та поверхнева енергія на межі рідинакристал // *Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології*. -2022. -В. 34-35. -С. 46-50. (Особистий внесок здобувача: розробка алгоритму моделювання, проведення моделювання міжфазної границі, розрахунок поверхневої енергії, участь у формуванні основних положень та висновків).

6.2. Публікації у наукових періодичних виданнях інших держав, що проіндексовані в наукометричних базах Scopus та/або Web of Science:

4. **V. Plechystyy**, I. Shtablavyi, K. Rybacki, S. Winczewski, S. Mudry, J. Rybicki. Short-range order structure and free volume distribution in liquid bismuth: X-ray diffraction and computer simulations studies // *Philosophical Magazine*. -2020. -V. 100(17). -P. 2165-2182. (Особистий внесок здобувача: розробка алгоритму моделювання, моделювання структури за різних температур, розробка алгоритмів обробки результатів моделювання, участь у формуванні основних положень та висновків). Видання індексується у наукометричних базах Scopus та Web of Science; кuartиль Q2.

5. **V. Plechystyy**, I. Shtablavyi, K. Rybacki, S. Winczewski, S. Mudry, J. Rybicki. Surface diffusion and cluster formation of gold on the silicon (111) // *Journal of Achievements in Materials and Manufacturing Engineering*. -2020. -V. 101(2). -P. 49 - 59. (Особистий внесок здобувача: розробка алгоритму моделювання, моделювання самоорганізації атомів золота, аналіз результатів моделювання та розробка алгоритмів для цього, участь у формуванні основних положень та висновків). Видання індексується у наукометричних базах Scopus та Web of Science; кuartиль Q3.

6. **V. Plechystyy**, I. Shtablavyi, K. Rybacki, S. Winczewski, S. Mudry, J. Rybicki. Structure of the interlayer between Au thin film and Si-substrate: Molecular Dynamics simulations // *Materials Research Express* -2020. -V. 7(2). -P. 026553. (Особистий внесок здобувача: розробка алгоритму моделювання, моделювання міжфазної границі золото-кремній за різних температур і співвідношення кількості компонент, обчислення та аналіз функцій розподілу

на межі двох фаз, участь у формуванні основних положень та висновків). Видання індексується у наукометричних базах Scopus та Web of Science; квартиль Q2.

7. V. Plechystyy, I. Shtablavyi, S. Winczewski, K. Rybacki, B. Tsizh, S. Mudry, J. Rybicki. Effect of heat treatment on the diffusion intermixing and structure of the Cu thin film on Si (111) substrate: a molecular dynamics simulation study// Molecular Simulation. -2021. -V. 47(17). -P. 1381-1390. (Особистий внесок здобувача: розробка алгоритму моделювання, проведення симуляції міжфазної взаємодії міді та кремнію, розрахунок функцій розподілу атомів та вільного об'єму, участь у формуванні основних положень та висновків). Видання індексується у наукометричних базах Scopus та Web of Science; квартиль Q2.

8. V. Plechystyy, I. Shtablavyi, B. Tsizh, S. Mudry, Rybicki J. Atomic Composition and Structure Evolution of the Solid-Liquid Boundary in Al-Si System During Interfacial Diffusion and Contact Melting // Journal of Phase Equilibria and Diffusion. -2022. -V. 43. -P. 256-265. (Особистий внесок здобувача: розробка алгоритму моделювання, проведення симуляції міжфазної взаємодії та контактного плавлення алюмінію та кремнію, аналіз результатів моделювання, участь у формуванні основних положень та висновків). Видання індексується у наукометричних базах Scopus та Web of Science; квартиль Q2.

7. Апробація основних результатів дослідження на конференціях, симпозіумах, семінарах тощо

1. Плечистий В. Штаблавий І. Дослідження структури рідкого вісмуту методом молекулярної динаміки // Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЄВРИКА–2017 Львів, 16-18 травня С. А-17 (усна доповідь)
2. Shtablavyi I. Mudry S., Rybicki J., Plechysty V., Winczewski S. Molecular Dynamic Simulations of Solid-Liquid Interface in Bi-Ni System // Joint conferences on advanced materials and technologies: The 14th Conference on Functional and Nanostructured Materials FNMA'17; The 7th International Conference on Physics of Disordered Systems PDS'17 25–29 September 2017 Lviv & Yaremche, Ukraine P 144 (усна доповідь)
3. Shtablavyi I. Plechystyy V., Mudry S. et all. Temperature-induced changes of the structure and free volume of liquid bismuth // International Conference PLMMP-2018 Kyiv May 18-22 2018 P. 64. (постерна доповідь)
4. V. Plechystyy, I. Shtablavyi, S. Winczewski, K. Rybacki, S. Mudry, J. Rybicki Phase formation and structure of the Cu thin film interlayer on Si(111) substrate: a molecular dynamics simulation study // International research and

- practice conference "Nanotechnology and nanomaterials" 27-30 August 2019 Lviv, Ukraine, P. 164(постерна доповідь)
5. V. Plechystyy, I. Shtablavyi, S. Winczewski, K. Rybacki, S. Mudry, J. Rybicki Molecular dynamics simulations of interlayer structure between Au thin film and Si-substrate // The 16th Conference on Functional and Nanostructured Materials FNMA'19, 31 August–7 September 2019 Athens and Agri Teodori, Greece P. 64. (постерна доповідь)
 6. V. Plechystyy, I. Shtablavyi, S. Winczewski, K. Rybacki, S. Mudry, J. Rybicki Molecular dynamic simulations of silicides formation at the interlayer boundary of Cu-Si system // XIV International Conference on Crystal Chemistry of Intermetallic Compounds, September 22-26, 2019, P. 9. (постерна доповідь)
 7. І. Штаблавий, Б. Соколюк, В. Плечистий, С. Мудрий Структура рідкометалевих композитів на основі евтектики $Al_{10,973}Ni_{0,027}$ з вуглецевими нанотрубками // Матеріали VI міжнародної наукової конференції “Фізика неупорядкованих систем”. – Львів, Україна. – 16 жовтня 2018р. – с. 2998-8. (усна доповідь)
 8. Shtablavyi I. Plechystyy V., Mudry S. Molecular dynamic simulations of the interlayer structure at the boundary of metal-silicon system // XXII International Seminar on Physics and Chemistry of Solids. – June 17-19, 2020 Lviv, Ukraine – P. 25 (усна доповідь)
 9. Shtablavyi I. Plechystyy V., Tsizh B., Mudry S. Free volume distribution in Bi-Zn liquid alloys // XXII International Seminar on Physics and Chemistry of Solids. – June 17-19, 2020 Lviv, Ukraine – P. 81. (постерна доповідь)
 10. Plechystyy V., Shtablavyi I., Winczewski S., Rybacki K., Mudry S., Rybicki J. Evolution of the atomic composition and structure of the interfacial boundary in the aluminum-silicon system // XVII INTERNATIONAL FREIK CONFERENCE ON PHYSICS AND TECHNOLOGY OF THIN FILMS AND NANOSYSTEMS Ivano-Frankivsk, October 11-16, 2021 P. 111 (постерна доповідь)

8. Наукове значення виконаного дослідження із зазначенням можливих наукових галузей та розділів програм навчальних курсів, де можуть бути застосовані отримані результати

В роботі отримано важливі результати комп'ютерного моделювання структури та властивостей границі на межі фаз, що значною мірою розширюють уявлення про термодинамічні та кінетичні умови формування фазового складу, структури та фізичних властивостей композитних матеріалів з металевою матрицею. Наукові результати, отримані в роботі, які стосуються формування фаз на межі рідина-кристал в системах метал-напівпровідник, мають важливе значення для розвитку фундаментальних

знань теорії фазових перетворень, а також для створення практичних рекомендацій з формування нанокompозитів з металевою матрицею. Результати виконаного дослідження можуть бути використані у навчальних курсах спеціальностей 104 “Фізика та астрономія” та 105 “Прикладна фізика та наноматеріали”, зокрема, при вивченні дисциплін “Комп’ютерна інженерія матеріалів різної розмірності”, “Фізика кластерних та наноструктурних матеріалів” та “Проблеми електронного наноматеріалознавства”.

9. Практична цінність результатів дослідження із зазначенням конкретного підприємства або галузі, де вони можуть бути застосовані

Отримані в роботі наукові результати і встановлені фізичні закономірності становлять практичний інтерес при створенні нанокompозитів та конструкцій на їхній основі, а також інтелектуальних матеріалів з властивостями, які можна контролювано змінювати. Важливий аспект використання результатів роботи з практичної точки зору полягає в тому, що отримані моделі дозволяють обрати оптимальні режими отримання матеріалів у лабораторних умовах. Результати роботи можуть бути використані при виробництві композитів для авіаційних матеріалів та матеріалів бронетехніки.

10. Оцінка структури дисертації, її мови та стилю викладення

Дисертація за структурою, мовою та стилем викладення відповідає вимогам МОН України.

Дисертацію заслухано та обговорено на фаховому семінарі кафедри фізики металів Львівського національного університету імені Івана Франка (протокол № 10 від 13.09.2023 р).

У ході обговорення дисертації суттєвих зауважень, які стосуються суті роботи, не було висунуто.

В цілому дисертаційна робота Плечистого Валерія Станіславовича «Вивчення процесів фазоутворення на межі рідина-кристал в нанокompозитах з металевою матрицею» є завершеною науковою працею в межах поставлених завдань, у якій розв’язана наукова проблема впливу термодинамічних умов та природи компонент сплавів на процес фазоутворення на межі двох фаз в системах Au(Cu, Al)-Si як результат контактного плавлення.

Основні результати наукового дослідження відображені у 8 наукових статтях, з них 3 опубліковано у наукових фахових виданнях України та 5 – у закордонних періодичних виданнях (Велика Британія, США, Польща), що проіндексовані у наукометричних базах Scopus та/або Web of Science.

На основі вищесказаного можна зробити такі висновки щодо поданої дисертаційної роботи:


1. За актуальністю обраної теми, обсягом, достовірністю та рівнем апробації отриманих результатів, науковою новизною, обґрунтованістю висновків, практичною цінністю дисертаційна робота «Вивчення процесів фазоутворення на межі рідина-кристал в нанокompозитах з металевою матрицею» відповідає вимогам наказу МОН України № 40 від 12.01.2017 р. «Про затвердження Вимог до оформлення дисертації» та п. 6 «Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження доктора філософії», затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022 року №44 (з наступними змінами).

2. Дисертація відповідає спеціальності 104 Фізика та астрономія (галузь знань 10 «Природничі науки»).

3. Наукові праці Плечистого В. С., опубліковані за результатами дисертаційної роботи, за кількістю та якістю відповідають пп. 8-9 «Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження доктора філософії», затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022 року №44 (з наступними змінами).

4. Дисертація «Вивчення процесів фазоутворення на межі рідина-кристал в нанокompозитах з металевою матрицею» Плечистого Валерія Станіславовича рекомендується для подання до розгляду та захисту у спеціалізованій вченій раді.

Головуючий на засіданні фахового семінару,
професор кафедри фізики металів,
доктор фіз.-мат. наук, доцент

 Ігор ШТАБЛАВИЙ

13.09.2023 року

Підпис доц. Ігоря ШТАБЛАВОГО засвідчую.

Вчений секретар
Львівського національного
університету імені Івана Франка,
доцент

 Ольга ГРАБОВЕЦЬКА