

До разової спеціалізованої ради ДФ 35.051.127
Львівського національного університету
імені Івана Франка
м. Львів, вул. Університетська, 1

РЕЦЕНЗІЯ

на дисертаційну роботу **Плечистого Валерія Станіславовича**
**“ Вивчення процесів фазоутворення на межі рідина-кристал в
нанокompозитах з металевою матрицею ”**,
представлену на здобуття ступеня доктора філософії
з галузі знань 10 «Природничі науки»
за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія»

Актуальність теми дисертації.

Композитні матеріали із заданими властивостями, як окремий клас таких матеріалів користуються великим попитом у якості конструкційних матеріалів для елементів приладів та машин, а також для виробництва пристроїв функціональної електроніки. Найбільш перспективними матеріалами з точки зору керування їх властивостями є композитні системи з металевою матрицею. Останнім часом досить широко досліджуються композити з силіцидами, карбідами та нітридами. В результаті цих досліджень розроблено багато методів отримання та гомогенізації таких композитів та вивчено їхні властивості.

Водночас існує багато проблем, які не дають змоги встановити фізико-хімічні основи синтезу композитів з металевою матрицею та закономірностей формування їхніх властивостей. Зокрема, до цих проблем належать питання взаємодії матриці з наповнювачем як під час синтезу, так і практичного використання композитів. У зв'язку з цим, подальше вивчення нового класу матеріалів – композитів з металевою матрицею та неметалевими нанонаповнювачами є актуальним оскільки сприятиме поглибленню знань про фізику наносистем і створить можливості для вирішення складного фундаментального та прикладного завдання – формування властивостей нанокompозитів на атомному рівні під час їхнього синтезу.

Практична цінність роботи

Практична цінність отриманих у дисертації результатів пов'язана з можливістю їхнього використання для створення режимів обробки матеріалів з покращеними фізичними властивостями. Інформація про атомну структуру та мікроструктуру композитів з металевою матрицею та неметалевими нанонаповнювачами залежно від режимів обробки дає змогу цілеспрямовано керувати структурою композитів, а, відповідно, і їхніми механічними властивостями.

Комп'ютерні методи дослідження використані в даній роботі, зокрема, метод молекулярної динаміки дали можливість отримати інформацію про структуру та властивості як об'ємних матеріалів, так і наносистем.

Ступінь наукової обґрунтованості результатів, сформульованих в роботі

Дисертаційна робота виконана на високому науково-методичному рівні, а сучасні методи досліджень та інтерпретації результатів експерименту та обчислень не дають приводу сумніватися в їхній достовірності.

Зокрема, 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. 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.

Стиль викладу результатів досліджень є науковим, а матеріал дисертації викладено в логічній послідовності. Беззаперечним свідченням високої наукової обґрунтованості результатів роботи є їхня публікація в провідних журналах та представленні наукового доробку автора на численних міжнародних та вітчизняних конференціях.

Наукова новизна

Найбільш вагомими результатами дисертаційної роботи Плечистого В. С., які відображають новизну роботи, є такі:

1. систематично досліджено структуру поверхневих та міжфазних границь метал-напівпровідник та оцінено її відхилення від структури об'ємних матеріалів;
2. вивчено процес самоорганізації кластерів золота на поверхні кремнію залежно від кількості атомів золота та температури;
3. досліджено атомний розподіл та профіль густини на межі золото (мідь, алюміній)-кремній та встановлено взаємозалежність між розмірами дифузійних та рідких зон поблизу границі розділу;
4. показано, що процес дифузійної взаємодії на межі розділу метал-кремній може бути описаний в рамках теорії контактного плавлення бінарних систем;

5. вивчено поверхневі властивості золота, міді, алюмінію та кремнію, а також міжфазні властивості на межі метал-напівпровідник за різних температур.

Зв'язок роботи з державними програмами, планами, темами

Результати досліджень, представлених в дисертаційній роботі, виконано на кафедрі фізики металів Львівського національного університету імені Івана Франка в рамках держбюджетних тем «Нові сплави з аморфними та нанокристалічними фазами для припоїв з широким температурним інтервалом використання» (2019 – 2021 р.р. № державної реєстрації 0119U002204), «Синтез, структура та властивості нанокомпозитних матеріалів на основі легких високоентропійних сплавів» (2021-2022 р.р. № державної реєстрації 0121U109730), «Оптимізація фізичних властивостей нанокомпозитів на основі металевих евтектик для безсвинцевих припоїв» (2022-2023 рр., № держреєстрації 0122U001521)

Структура і зміст дисертації

Дисертація Плечистого В. С. містить власні результати дослідження структури тонких шарів металевих та напівпровідникових матеріалів, а також кінетики формування міжфазової границі між ними методами комп'ютерного моделювання. Робота викладена на 194 сторінках друкованого тексту та складається з анотації, вступу, п'ятих розділів та загальних висновків, двох додатків. Дисертація містить 121 рисунок та трьох таблиць.

У вступі обґрунтовано актуальність роботи, описано мету досліджень та задачі, які були поставлені для досягнення мети, сформульовано новизну роботи та її практичне значення, а також подано інформацію про апробацію результатів досліджень.

Перший оглядовий розділ стосується загальної інформації про структуру границі між рідкою та кристалічною фазами. Описано також методи вивчення міжфазної границі. В цьому розділі наведено основи методу молекулярної динаміки та подано інформацію про потенціали міжатомної взаємодії, які використано для моделювання.

У другому розділі подано інформацію про методіку моделювання одно- та двофазних систем методом молекулярної динаміки та подано основні параметри, які використано для моделювання з допомогою пакету LAMMPS. Крім того, подано алгоритми, які було використано для обробки результатів моделювання.

Третій розділ присвячений представленню результати дослідження поверхневих шарів та границі між рідкою та кристалічною фазами для деяких щільно упакованих металів (Au, Cu, Al) та кремнію методом молекулярної динаміки. Моделювання здійснювали за температур поблизу точки плавлення. Аналіз отриманих результатів здійснювали за допомогою двовимірних та

тривимірних парних кореляційних функцій, а також параметрів, отриманих на їхній основі.

У четвертому розділі дисертації вивчено процеси плавлення, дифузії та фазоутворення у двокомпонентних системах Au-Si, Al-Si та Cu-Si. Моделювання виконано для різного співвідношення між компонентами та за різних температур. Використовуючи профілі густини та концентрації прослідковано кінетику формування міжфазної границі за різних умов.

П'ятий розділ роботи стосується обчислення деяких властивостей границі між рідкою та кристалічною фазами. Зокрема здійснено розрахунок коефіцієнта теплопровідності міжфазної границі, а також поверхневої енергії. Для розрахунку поверхневої енергії границі розділу було використано метод капілярних флуктуацій.

Повнота викладу матеріалів у роботах, які опубліковані автором

Результати рецензованої роботи відображено у публікаціях автора та широко апробовано на наукових конференціях. За матеріалом дисертаційної роботи опубліковано 8 праць, з яких 5 статей у провідних закордонних та вітчизняних фахових журналах, включених у наукометричні бази даних Scopus та Web of Science, та 11 тез доповідей на міжнародних наукових конференціях та семінарах.

Відомості про дотримання академічної доброчесності

Порушень академічної доброчесності в дисертаційній роботі Плечистого В. С. та його наукових публікаціях не виявлено.

Зауваження до дисертації

1. Використання періодичних граничних умов у двох напрямках для моделювання еволюції межі розділу між фазами веде до вивчення практично нескінченної площини сформованої з атомів металу. Було б доцільно вивчити поведінку невеликих наноострівців металів на поверхні кремнію для симуляції взаємодії нанорозмірних састинок з матрицею.
2. Можливо для підвищення точності моделювання варто було використати метод моделювання з перших принципів або гібридний метод.
3. В другому розділі роботи на рисунках наведено схеми алгоритмів алгоритми моделювання атомної структури, зображення яких нажаль важко прочитати.

Проте, наведені зауваження не впливають на загальну позитивну оцінку дисертації, яка засвідчує високий рівень кваліфікації здобувача.

Висновок щодо відповідності дисертації встановленим нормам.

Дисертація Плечистого Валерія Станіславовича на тему «**Вивчення процесів фазоутворення на межі рідина-кристал в нанокompозитах з металевою матрицею**», подана на здобуття ступеня доктора філософії в галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія», є завершеним дослідженням, в якому розглянуто актуальні проблеми вивчення композитів з металевою матрицею та неметалевими нанонаповнювачами. У роботі та наукових публікаціях дисертанта немає порушень академічної доброчесності. Вважаю, що за актуальністю, новизною, практичним значенням та обсягом результатів дисертаційна робота відповідає вимогам наказу МОН України № 40 від 12.01.2017 р. «Про затвердження Вимог до оформлення дисертації» та «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 №44 від 12 січня 2022 року, а її автор, Плечистий Валерій Станіславович, заслуговує присудження йому ступеня доктора філософії в галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія».

Рецензент:

Кандидат фізико-математичних наук,
доцент кафедри фізики металів
Львівського національного університету
імені Івана Франка, доцент

Андрій КОРОЛИШИН