

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 НАНОКОМПОЗИТАХ З МЕТАЛЕВОЮ МАТРИЦЕЮ ”**,
яка представлена на здобуття ступеня доктора філософії з галузі знань
10 «Природничі науки» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія»

Актуальність теми дисертації.

Розвиток сучасних технологій та виготовлення інноваційних матеріалів пов'язаний з дослідженнями структури на наномасштабному рівні, зокрема, одно- та двовимірних об'єктів. Такі наноструктурні матеріали завдяки своїм унікальним властивостям можуть змінювати властивості об'ємних матеріалів, у структуру яких вони введені. Композитні матеріали із заданими властивостями користуються великим попитом у якості конструкційних матеріалів для елементів машин та приладів, пристроїв функціональної електроніки.

Водночас, існує ряд проблем, які не дають змоги встановити фізико-хімічні основи синтезу композитів з металевою матрицею та закономірностей формування їхніх властивостей. До них належать питання взаємодії матриці з наповнювачем під час синтезу та експлуатації. Основною проблемою вивчення наноматеріалів в реальному часі є відсутність прямих експериментальних методик для таких досліджень на атомному рівні. Тому значної популярності набули методи комп'ютерного моделювання, які дають змогу вивчати та прогнозувати атомну структуру і властивості наноматеріалів.

Практична цінність роботи

Отримані в роботі наукові результати та фізичні закономірності становлять практичний інтерес при створенні нанокompозитів та конструкцій на їхній основі, а також інтелектуальних матеріалів з властивостями, які можна контролювати змінювати. Важливий аспект використання результатів роботи з практичної точки зору полягає в тому, що отримані моделі дозволяють обрати оптимальні режими створення матеріалів у лабораторних умовах, формування властивостей нанокompозитів на атомному рівні під час їхнього синтезу. Отримані результати також можуть бути використані для розробки методичних та наукових засад виготовлення нанокompозитів та конструкцій на основі одно-

та двокомпонентних систем з кремнію, золота, міді та алюмінію, оптимізації виробничих процесів, та цілеспрямованого керування структурою та властивостями нанокompозитів, а також для навчання студентів за напрямами прикладної та загальної фізики, зокрема у матеріалознавчих курсах.

Ступінь наукової обґрунтованості результатів, сформульованих в роботі

Дисертація оформлена у послідовному та логічному порядку, виконана на високому науково-методичному рівні та відповідає критеріям наукового стилю. Основний матеріал роботи представлено чітко і структуровано, розрахунки та моделювання виконані на високому теоретичному рівні. Для моделювання структури та деяких властивостей міжфазової границі однокомпонентних та двокомпонентних систем використано добре апробований метод молекулярної динаміки.

Про високу наукову обґрунтованість результатів роботи свідчить значна кількість публікацій у рецензованих журналах, що входять до баз даних Scopus та Web of Science, та апробація результатів на міжнародних конференціях.

Наукова новизна

Основні наукові результати, які представлені в дисертаційній роботі Плечистого В.С., та відображають новизну роботи є такими:

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 метал (Au, Cu, Al) – кремній та встановлено взаємозалежність між розмірами дифузійних та рідких зон поблизу границі розділу;
4. 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

Дисертаційну роботу виконано згідно з основними напрямами досліджень кафедри фізики металів фізичного факультету 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. № державної реєстрації 0119U002204), «Синтез, структура та властивості нанокompозитних матеріалів на основі легких високоентропійних сплавів» (2021-2022 р.р.

№ державної реєстрації 0121U109730), «Оптимізація фізичних властивостей нанокompозитів на основі металевих евтектик для безсвинцевих припоїв» (2022-2023 рр., № держреєстрації 0122U001521).

Структура і зміст дисертації (Характеристика основних положень роботи)

Дисертація Плечистого В.С. є науковим дослідженням, яке представлено на 210 сторінках друкованого тексту, в якому викладені результати дослідження структури, атомного складу, процесів плавлення та дифузії, а також обчислення деяких поверхневих та міжфазних властивостей одно- та двокомпонентних систем на основі кремнію, золота, міді та алюмінію.

Робота складається з анотації, вступу, п'яти розділів, висновків та містить 3 таблиці, 121 рисунок, 2 додатки, у яких викладено список публікацій за темою дисертації і відомості про апробацію, коди програм, та список використаних джерел, який налічує 178 посилань.

У *першому розділі* наведено літературні дані щодо дослідження структури границі між рідкою та кристалічною фазами, описано методи вивчення міжфазної границі, наведено основи методу молекулярної динаміки та подано інформацію про потенціали міжатомної взаємодії, які використано для моделювання.

У *другому розділі* описано методіку моделювання одно- та двофазних систем методом молекулярної динаміки та основні параметри, які використано для моделювання за допомогою пакету LAMMPS, а також представлено алгоритми, які було використано для обробки результатів моделювання.

Третій розділ присвячений дослідженню поверхневих шарів та границі між рідкою та кристалічною фазами щільно упакованих металів (Au, Cu, Al) та кремнію методом молекулярної динаміки для температур поблизу точки плавлення. Аналіз отриманих результатів здійснювали за допомогою двовимірних та тривимірних парних кореляційних функцій, а також параметрів, отриманих на їхній основі.

Четвертий розділ присвячено вивченню процесів плавлення, дифузії та фазоутворення у двокомпонентних системах Au-Si, Al-Si та Cu-Si.

У *п'ятому розділі* викладено обчислення деяких властивостей границі між рідкою та кристалічною фазами, та розрахунки коефіцієнта теплопровідності міжфазної границі, а також поверхневої енергії.

Повнота викладу матеріалів у роботах, які опубліковані автором

Дослідницька робота дисертанта широко апробована на міжнародних наукових конференціях та відображена у наукових публікаціях у рецензованих і фахових наукових виданнях. Зокрема, на основі дисертаційної роботи

опубліковано 8 статей у провідних спеціалізованих журналах, 7 з яких включені до баз даних Scopus та Web of Science, а також представлено 10 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. У роботі проведено моделювання процесу плавлення кремнію методом молекулярної динаміки, зокрема моделювання структури кремнію за температур нижче та вище плавлення та порівняння змодельованих та експериментальних радіальних функцій розподілу атомів. Водночас не відображено часової характеристики змодельованого процесу, як змінюються з часом парні кореляційні функції, міжатомні відстані та координаційні числа.

2. При моделюванні межі розділу двох фаз автор використовує комірку з атомами, які утворюють вільну поверхню. Варто було б розглянути вплив вільної поверхні на процес дифузії за різних температур.

3. Автором обчислено деякі властивості золота, міді та алюмінію та проведено порівняння результатів моделювання використовуючи різні потенціали міжатомної взаємодії, що дає можливість вибору найоптимальнішого потенціалу. Однак відсутні такі обчислення та порівняння для кремнію.

4. З метою перевірки достовірності структурних досліджень отриманих з використанням різних потенціалів автор виконав моделювання структури кремнію за різних температур і порівняння зі структурними даними отриманими експериментальними методами. На рис. 3.1 і 3.2 представлено експериментальні та розраховані парні кореляційні функції (ПКФ) для об'ємного Si. Однак експериментальна ПКФ отримана для температури 1713 К, а розраховані – для температур 1773 К і 1823 К. При цьому розрахованої ПКФ для температури 1713 К не наведено.

5. У дисертаційній роботі бракує переліку умовних скорочень, оскільки автор часто ними послуговується. У тексті присутні помилки, у тому числі друкарські, у незначній кількості. У підписах до рисунків подекуди бракує пояснень та уточнень.

Однак, 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 завершеною роботою, яка стосується дослідження структури, атомного складу, процесів плавлення, дифузії в одно- та двокомпонентних системах на основі кремнію, золота, міді та алюмінію. Робота виконана з дотриманням загальноприйнятих правил оформлення науково-дослідних робіт. Порухень академічної доброчесності у дисертації та наукових публікаціях не виявлено. Вважаю, що 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,
старший дослідник, доцент кафедри фізики металів
Львівського національного університету
імені Івана Франка

Юлія НИКИРУЙ