

РІШЕННЯ СПЕЦІАЛІЗОВАНОЇ ВЧЕНОЇ РАДИ ПРО ПРИСУДЖЕННЯ СТУПЕНЯ ДОКТОРА ФІЛОСОФІЇ

Спеціалізована вчена рада ДФ 35.051.127 Львівського національного університету імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України, м. Львів, прийняла рішення про присудження ступеня доктора філософії з галузі знань 10 «Природничі науки» на підставі прилюдного захисту дисертації «Вивчення процесів фазоутворення на межі рідинакристал в нанокompозитах з металевою матрицею» за спеціальністю 104 – «Фізика та астрономія». 26 грудня 2023 року.

Плечистий Валерій Станіславович, 12.04.1994 року народження, громадянин України, освіта повна вища. У 2017 році закінчив Львівський національний університет та здобув ступінь вищої освіти «Магістр» за спеціальністю «Фізика».

З 30.09.2018 року по 30.09.2022 року навчався в аспірантурі на кафедрі фізики металів Львівського національного університету імені Івана Франка (денна форма навчання).

Дисертацію виконано на кафедрі фізики металів Львівського національного університету імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України, м. Львів.

Науковий керівник: **Мудрий Степан Іванович**, доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри фізики металів Львівського національного університету імені Івана Франка МОН України.

Здобувач має 8 наукових публікацій за темою дисертації, з них 5 статей у періодичних наукових виданнях інших держав, 3 статті у наукових фахових виданнях України, 0 монографій, зокрема:

1. **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. (**Scopus**, **квартиль Q2**) DOI: <https://doi.org/10.1080/14786435.2020.1756500>
2. **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. (**Scopus**, **квартиль Q2**) DOI: 10.1088/2053-1591/ab5e76
3. **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

У дискусії взяли участь голова і члени спеціалізованої вченої ради та присутні на захисті фахівці:

1. Плевачук Юрій Олександрович, доктор фізико-математичних наук, професор, начальник науково-дослідної частини, професор кафедри фізики металів Львівського національного університету імені Івана Франка МОН України, без зауважень.

2. Гіржон Василь Васильович, доктор фізико-математичних наук, професор, професор кафедри фізичного матеріалознавства Національного університету «Запорізька політехніка» МОН України, надав позитивний відгук із зауваженням:

1. В роботі вивчено формування міжфазної границі на межі метал-кремній методом молекулярної динаміки. Варто було б порівняти отримані результати з експериментальними даними, що дало б змогу верифікувати їх.
2. Дисертантом виконано аналіз атомних конфігурацій лише з використанням координат атомів. На мою думку, аналіз розподілу швидкостей атомів в дифузійній зоні а також візуалізація їхніх напрямів дали б додаткову інформацію, яка стосується процесів що відбуваються на межі фаз.
3. Відомо, що реальні процеси дифузії значною мірою залежать від дефектів кристалічної структури матеріалів. Нажаль в даній роботі цього не було враховано.
4. Результат моделювання методом молекулярної динаміки великою мірою залежить від вибору потенціалу міжатомної взаємодії. У зв'язку з цим, виникає питання про відтворюваність результатів моделювання використовуючи різні потенціали взаємодії.
5. В третьому та четвертому розділах висота деяких парних кореляційних функцій є явно завищеною і не узгоджується з імовірною величиною координаційних чисел для досліджених матеріалів.

3. Маркович Богдан Михайлович, доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри прикладної математики Національного університету «Львівська політехніка» МОН України, надав позитивний відгук із зауваженнями:

1. У другому розділі дисертації наведено блок-схеми алгоритмів обробки результатів моделювання. Проте, інформативність цих блок-схем, на мою думку, є недостатньою.
2. Відомо, що дифузійна взаємодія двох фаз є тривалим процесом, а час моделювання вимірюється наносекундами. Зважаючи на це, виникають сумніви, що автор в роботі вивчає межу розділу в рівноважних умовах.
3. В роботі, в основному, досліджено дифузію атомів для двокомпонентних систем в напрямі, перпендикулярному до межі розділу фаз. Проте важливими в цьому випадку є також дифузійні процеси в площині, яка співпадає з межею розділу, чого не було вивчено в роботі.

4. Королишин Андрій Володимирович, кандидат фізико-математичних наук, доцент, доцент кафедри фізики металів Львівського національного університету імені Івана Франка МОН України, надав позитивну рецензію із зауваженнями:

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 частинок 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.

5. Никируй Юлія Семенівна, кандидат фізико-математичних наук, старший дослідник, доцент кафедри фізики металів Львівського національного університету імені Івана Франка МОН України, надала позитивну рецензію із зауваженнями:

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.
- 4.3 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.

Загальна оцінка роботи і висновок. Дисертаційне дослідження **Плечистого Валерія Станіславовича на тему «Вивчення процесів фазоутворення на межі рідина-кристал в нанокompозитах з металевою матрицею»**, є самостійною та ґрунтовною науковою працею, що виконана з дотриманням вимог академічної доброчесності. Наукова новизна одержаних результатів полягає у наступному:

1. Розширено уявлення про термодинамічні умови формування структури, а також фізичних властивостей поверхневих та міжфазових областей товщиною до декількох десятків атомних шарів однокомпонентних та двокомпонентних систем в рідкому і кристалічному станах.
2. Систематично досліджено структуру поверхневих та міжфазних границь метал-напівпровідник та оцінено її відхилення від структури об'ємних матеріалів.
3. Вивчено процес самоорганізації кластерів золота на поверхні кремнію залежно від кількості атомів золота та температури.
4. Досліджено атомний розподіл та профіль густини на межі золото (мідь, алюміній)-кремній та встановлено взаємозалежність між розмірами дифузійних та рідких зон поблизу границі розділу.

5. Показано, що процес дифузійної взаємодії на межі поділу метал-кремній може бути описаний в рамках теорії контактного плавлення бінарних систем.
6. Вивчено поверхневі властивості золота, міді, алюмінію та кремнію, а також міжфазні властивості на межі метал-напівпровідник за різних температур.

Результати досліджень, які наведені у дисертаційній роботі та опубліковані у наукових статтях, належать автору і є його науковим доробком. Викладені в дисертації висновки й положення наукової новизни отримано на підставі особистих досліджень автора.

Надійність і обґрунтованість отриманих у ході наукового дослідження результатів ґрунтуються на відповідних наукових публікаціях. У вивченні проблематики дисертації застосовується класичний метод МД за допомогою пакету LAMMPS. Міжатомну взаємодію визначають за допомогою потенціалів, отриманих за допомогою методу зануреного атома або його модифікованої версії. Для аналізу результатів використовують тривимірні та двовимірні парні кореляційні функції, атомний профіль густини та концентрації, а також параметри, отримані на їх основі.

Результати комп'ютерного моделювання, які викладені у дисертації, розширюють основні знання про взаємодію компонентів у системах метал-кремній на атомному рівні. Ці дані можуть бути використані для пояснення результатів експериментальних досліджень взаємодії кремнію з алюмінієм, міддю та золотом при різних температурах. З практичної точки зору отримані висновки можуть служити основою для удосконалення процесів отримання композитів із металевою матрицею, поверхневого легування напівпровідників та планарних технологій у напівпровідниковій техніці.

За кількістю і рівнем публікацій, апробацією на наукових конференціях дисертація **«Вивчення процесів фазоутворення на межі рідина-кристал в нанокompозитах з металевою матрицею»** відповідає вимогам наказу МОН України № 40 від 12.01.2017 року «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» (Постанова Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022 р. № 44), а її автор, Плечистий Валерій Станіславович, заслуговує присудження ступеня доктора філософії з галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 104 – «Фізика та астрономія».

Результати відкритого голосування:

«За» – 5 членів ради,

«Проти» – 0 членів ради.

На підставі результатів відкритого голосування спеціалізована вчена рада ДФ 35.051.127 Львівського національного університету імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України, м. Львів, присуджує **Плечистому Валерію Станіславовичу** ступінь доктора філософії з галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 104 – «Фізика та астрономія».

Голова
спеціалізованої
вченої ради
ДФ 35.051.127



проф. **Юрій ПЛЕВАЧУК**

