

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

ВІДГУК

офіційного опонента, доктора фізико-математичних наук, професора,
професора кафедри фізичного матеріалознавства
Національного університету «Запорізька політехніка»

Гіржона Василя Васильовича

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

Актуальність теми дисертаційного дослідження

Дифузійні процеси на межі розділу фаз відіграють важливу роль не лише у випадку класичних методів отримання матеріалів а також у багатьох сучасних технологіях наноматеріалознавства. Зокрема, крім синтезу композитних матеріалів міжфазна взаємодія є важливою у випадку плавлення-кристалізації, вирощування монокристалів, епітаксійного отримання тонких плівок, поверхневої обробки матеріалів а також планарних технологій у напівпровідниковому матеріалознавстві. В деяких випадках міжфазна дифузія має позитивний вплив на властивості отриманих матеріалів, а в інших навпаки.

Вивчення описаних явищ експериментальними методами в реальному часі на атомному рівні є складним процесом внаслідок великої швидкості дифузії та складності підготовки зразків для вивчення наприклад методами трансмісійної електронної мікроскопії. Зважаючи на це, методи комп'ютерного моделювання можуть стати чи не єдиним методом вивчення динамічних властивостей матеріалів, в тому числі і процесів дифузії. Для комп'ютерного моделювання структури та фізичних властивостей матеріалів на атомному рівні найчастіше використовують класичний або квантовий метод молекулярної динаміки. Для вивчення відносно великих систем доцільніше використовувати класичний метод, який було використано в даній роботі.

Взявши до уваги зазначене вище, можна стверджувати, що дослідження проведені в цій роботі які були виконані методом молекулярної динаміки є актуальними, оскільки дають змогу отримати детальну інформацію про формування міжфазної границі в гетерогенних системах на атомному рівні.

Мета дослідження – вивчення процесу формування структури та розподілу компонент вільної поверхні однокомпонентних матеріалів (Au, Cu, Al, Si) та міжфазної границі двокомпонентних систем Au-Si, Cu-Si та Al-Si за температур поблизу точки плавлення. На основі отриманих результатів встановити механізм взаємодії фаз на межі рідина-кристал.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами, грантами

Дисертаційну роботу виконано згідно з основними напрямками досліджень кафедри фізики металів фізичного факультету Львівського національного університету імені Івана Франка відповідно до держбюджетних тем:

1. «Нові сплави з аморфними та нанокристалічними фазами для припоїв з широким температурним інтервалом використання» (2019 – 2021 р.р. № державної реєстрації 0119U002204),

2. «Синтез, структура та властивості нанокompозитних матеріалів на основі легких високоентропійних сплавів» (2021-2022 р.р. № державної реєстрації 0121U109730),

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

Наукова новизна одержаних результатів

У рамках дисертаційної роботи вперше:

- вивчено та проаналізовано процес самоорганізації атомів золота на поверхні кремнію та оцінено енергетичні параметри цієї самоорганізації.
- показано, що міжфазна взаємодія в системах метал-кремній може бути пояснена використовуючи формалізм ефекту контактного плавлення металів;
- проаналізовано розподіл вільного об'єму на межі розділу фаз а на основі цього пояснено механізм дифузійного змішування компонент сплавів;
- запропоновано методикау визначення коефіцієнтів температуро- та теплопровідності використовуючи моделювання матеріалів за нерівномірного розподілу температури вздовж досліджуваного зразка.

Наукове та практичне значення

Результати комп'ютерного моделювання, які були отримані в роботі розширюють фундаментальну інформацію про взаємодію компонент в системах метал-кремній на атомному рівні. Отримані дані можна використати для пояснення експериментальних досліджень взаємодії кремнію з алюмінієм, міддю та золотом за різних температур. З практичної точки зору, отримані

результати можна використати для оптимізації режимів отримання композитів з металевою матрицею, поверхневого легування напівпровідників та планарних технологій в напівпровідниковій техніці.

Повнота викладення матеріалу дисертації у наукових публікаціях

Результати досліджень опубліковано у наукових статтях високоцитованих журналів а також представлені та апробовані на міжнародних та вітчизняних конференціях та семінарах. За результатами досліджень опубліковано вісім статей, сім з яких в журналах що індексуються в міжнародних наукометричних базах даних Web of Science та/або Scopus. З них дві статті опубліковано у виданні що належить до другого квартилю (Q2), і дві до третього (Q3). Опубліковано також десять тез доповідей на конференціях. На основі аналізу обсягу та змісту публікацій В. Плечистого можна стверджувати, що вони цілковито відображають результати дисертаційної роботи. В них детально описані усі результати проведених досліджень, які свідчать про розкриття теми дисертації, досягнення її мети й обґрунтування наукової новизни.

Відсутність порушень академічної доброчесності

Порушень академічної доброчесності в дисертаційній роботі В. С. Плечистого "Вивчення процесів фазоутворення на межі рідина-кристал в нанокompозитах з металевою матрицею" та в його наукових публікаціях за темою дисертації не виявлено.

Структура та зміст дисертації, її завершеність та відповідність встановленим вимогам

Представлена дисертаційна робота відповідає вимогам до оформлення дисертацій відповідно до наказу Міністерства освіти і науки України № 40 від 12.01.2017 р. «Про затвердження Вимог до оформлення дисертації».

Дисертація В. С. Плечистого являє собою обґрунтоване, логічно побудоване, завершене наукове дослідження. Вона складається з анотації, вступу, п'яти розділів, висновків, переліку використаних джерел (178 найменувань) та додатку. Дисертація викладена на 208 сторінках та містить 121 рисунок, 3 таблиці та два додатки.

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми роботи, сформульовано мету, завдання, об'єкт і предмет дослідження, вказано використані методи досліджень, а також окреслено наукову новизну і практичне значення одержаних результатів, виділено особистий внесок здобувача та відомості про апробацію результатів роботи.

В першому розділі здійснено огляд літератури щодо структури границі фаз рідина-кристал та дифузійні явища, які відбуваються у процесі її формування. В цьому розділі описано також основи моделювання матеріалів методом молекулярної динаміки, а також міжатомні потенціали які було використано для моделювання в даній роботі. Здійснений аналіз літературних даних дозволив зробити висновки, які стали основою для проведення моделювання міжфазної границі матеріалів, представлених у цій роботі.

Другий розділ дисертаційної роботи стосується опису методики моделювання матеріалів класичним методом молекулярної динаміки за допомогою пакету LAMMPS, а також наведено інформацію про методи візуалізації результатів моделювання а також їхню обробку. Додатково автором у другому розділі наведено алгоритми обчислення двовимірних функцій атомного розподілу, профілю концентрації та густини а також алгоритми аналізу процесу самоорганізації атомів на поверхні кремнію.

У третьому розділі наведено результати дослідження структури поверхневих атомних шарів кремнію, алюмінію, міді та золота залежно від відстані до поверхні. Дослідження виконано з використанням аналізу двовимірних парних кореляційних функцій а також функцій розподілу атомної густини та координатних чисел. Використовуючи методи обробки та візуалізації результатів моделювання з допомогою пакету OVITO встановлено еволюцію переходу атомної структури від впорядкованої кристалічної в об'ємі матеріалів до невпорядкованої рідкої – на поверхні.

Четвертий розділ стосується дослідження структури межі розділу метал-напівпровідник, що дало змогу зробити висновки про кінетику її формування. В цьому розділі вивчено взаємодію кремнію з атомними шарами металу кількістю від двох до десяти за температур як нижче так і вище лінії солідус. Як і в попередньому розділі для аналізу зони дифузійного змішування використано парціальні парні кореляційні функції, профілі атомної густини та концентрації а також розподіл значень парціального вільного об'єму.

У п'ятому розділі наведено результати обчислення коефіцієнтів температуропровідності та теплопровідності а також поверхневу енергію для кремнію, алюмінію, міді та золота. Для обчислення вказаних властивостей також використано атомні конфігурації отримані методом молекулярної динаміки.

В кінці дисертаційної роботи сформульовано **висновки**, які повністю охоплюють та узагальнюють результати отримані в роботі. Достовірність результатів забезпечена використанням добре апробованих методів моделювання та обробки результатів моделювання.

Далі наводиться **список використаної літератури** а також два **додатки** в першому з яких наведено список публікацій здобувача за темою дисертації, а в другому – коди програм, які було використано для обробки результатів моделювання.

Ступінь обґрунтованості та достовірності наукових положень, висновків, сформульованих у дисертації

Дисертаційна робота В. С. Плечистого «Вивчення процесів фазоутворення на межі рідина-кристал в нанокompозитах з металевою матрицею» виконана на високому науковому та методичному рівні і є завершеним дослідженням в межах поставлених завдань. Для моделювання використано добре апробований метод молекулярної динаміки, методи візуалізації та обробки результатів моделювання. Рукопис дисертації написаний українською літературною мовою з використанням адекватної фахової термінології.

Дискусійні положення й зауваження щодо змісту та оформлення дисертації.

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 при використанні різних потенціалів 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.

Незважаючи на це, висловлені зауваження не впливають на загальне позитивне враження про дисертаційну роботу та не зменшують її наукової цінності.

Загальний висновок про відповідність роботи встановленим вимогам.

Вважаю, що дисертація Плечистого Валерія Станіславовича “Вивчення процесів фазоутворення на межі рідина-кристал в нанокompозитах з металевою матрицею ” є цілісною і завершеною науковою працею, виконаною на високому науковому рівні, отримані результати є достовірними, висновки – обґрунтованими

Дисертаційна робота "Вивчення процесів фазоутворення на межі рідина-кристал в нанокompозитах з металевою матрицею" відповідає вимогам Порядку підготовки здобувачів вищої освіти ступеня доктора філософії та доктора наук у вищих навчальних закладах (наукових установах), затвердженого постановою Кабінету Міністрів України № 261 від 23.03.2016 р. (зі змінами і доповненнями від 03.04.2019 р. № 283), а також вимогам, передбаченим Порядком присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії, затвердженим Постановою Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022 року № 44, а її автор – Плечистий Валерій Станіславович – заслуговує присудження ступеня доктора філософії у галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія».

Офіційний опонент:

доктор фізико-математичних наук,
професор, професор кафедри
фізичного матеріалознавства
Національного університету
«Запорізька політехніка»

Василь ГІРЖОН