

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,
завідувача кафедри прикладної математики

Національного університету «Львівська політехніка»,

професора **Марковича Богдана Михайловича**

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 дисертаційного дослідження

Композитні матеріали, і в першу чергу нанокompозити є перспективним класом матеріалів з унікальною комбінацією фізико-хімічних властивостей. Незважаючи на це, композити з металевою матрицею на даний час не використовують так широко, як полімерні композитні матеріали у зв'язку з проблемами, які пов'язані з їхнім синтезом та стосуються взаємодії металевої матриці та наповнювача. Зокрема, в багатьох випадках виникають проблеми з поганою змочуваністю наповнювача металевою матрицею, що може призвести до погіршення властивостей композиту.

Необхідність розуміння явищ, які відбуваються на межі двох фаз з різними властивостями сприяють розвитку нових та вдосконалення класичних методів дослідження композитів. Оскільки експериментальні методи не завжди можуть дати однозначну відповідь на питання про міжфазну взаємодію в композитах з металевою матрицею, виникає необхідність використання комп'ютерних методів дослідження та прогнозування у матеріалознавстві.

На макроскопічному рівні досліджень досить вдало використовують метод скінчених елементів для дослідження матеріалів, хоча він не дає повної інформації про їхню структуру та властивості на атомному рівні. З-поміж атомно-молекулярних методів комп'ютерного моделювання матеріалів найбільш інформативним є метод молекулярної динаміки, який дає змогу вивчати

не лише статичні властивості матеріалів, а й дозволяє спостерігати динаміку рівноважних та нерівноважних процесів, які відбуваються в матеріалах.

Зважаючи на вищезазначене, вивчення процесів формування межі між фазами в композитних матеріалах є важливою задачею сучасного матеріалознавства, а використання методу молекулярної динаміки для цієї мети є найбільш перспективним. Це твердження безумовно відображає актуальність представленої до захисту роботи.

Мета дослідження — молекулярно-динамічне моделювання структури поверхневих атомних шарів металів зі щільним упакуванням та кремнію, а також міжфазної границі в системах Au-Si, Cu-Si та Al-Si. Дослідження кінетики формування реакційно- та дифузійно-контрольованих структурних одиниць в околі температури плавлення.

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 нанокристаличними 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 р.р., № державної реєстрації 0122U001521)

Наукова новизна одержаних результатів

Автор дисертаційної роботи вперше дослідив структуру поверхневих шарів деяких металів та кремнію поблизу температури плавлення та встановив її відмінності зі структурою об'ємних матеріалів. Вперше вивчено процес формування міжфазної границі в системах «метал–кремній» на атомному рівні методом молекулярної динаміки. Встановлено визначальний вплив ефекту контактного плавлення у випадку формування перехідного шару між фазами для евтектичних систем. Вивчено поверхневі властивості золота, міді, алюмінію.

нію та кремнію, а також міжфазні властивості на межі метал-напівпровідник за різних температур.

Наукове та практичне значення результатів

Отримані в дисертації результати можуть бути використані для вдосконалення методики отримання композитів з металевою матрицею, а також рідкофазного спікання при формуванні матеріалів методом порошкової металургії та адитивних технологій. Крім того, отримані в роботі дані дозволять поглибити фундаментальні знання про механізми та кінетику фазових перетворень на атомному рівні

Повнота викладення матеріалу дисертації у наукових публікаціях

За матеріалами дисертаційної роботи опубліковано 7 статей, що індексуються наукометричними базами Web of Science та Scopus, з них три статті опубліковано у виданнях, що належать до другого (Q2) кuartилю, дві — до третього (Q3) кuartилю та дві статті опубліковано в журналах що належать до четвертого кuartилю (Q4). Також опубліковано тези 10 доповідей на всеукраїнських та міжнародних конференціях. Публікації відтворюють зміст та основні результати дисертації.

Відсутність порушень академічної доброчесності

В дисертаційній роботі «Вивчення процесів фазоутворення на межі рідина–кристал в нанокompозитах з металевою матрицею» та у наукових публікаціях за темою дисертації порушень академічної доброчесності не виявлено.

Структура та зміст дисертації, її завершеність та відповідність встановленим вимогам

Подана до захисту дисертація є кваліфікаційною науковою працею на правах рукопису і складається з анотації, вступу, 5 розділів, висновків, переліку використаних джерел з 178 найменувань та додатків. Зміст основної частини викладений на 182 сторінках машинописного тексту та містить 121 рисунок, 3 таблиці та два додатки.

У **вступі** обґрунтовано тему та актуальність роботи, сформульовано її мету та завдання, відображено наукову новизну та практичне значення отриманих результатів.

В **першому розділі** здійснено огляд літератури, яка стосується тематики наукових досліджень дисертаційної роботи. Зокрема, детально описано ре-

зультати досліджень структури міжфазної границі, наведено її структурні моделі та описано дифузійні процеси на межі двох фаз. Крім того, наведено коротку інформацію про метод молекулярної динаміки, який було використано для досліджень в роботі, а також описано потенціали міжатомної взаємодії, які було використано для моделювання. У результаті проведеного аналізу було окреслено основні завдання, які необхідно вирішити в роботі.

В **другому розділі** детальніше описано методику моделювання методом молекулярної динаміки використовуючи пакет LAMMPS. У цьому розділі наведено основні параметри, які було використано в робочому скрипті для моделювання, а також методику створення початкових атомних конфігурацій. Також тут описано основні алгоритми обробки результатів моделювання, програми для яких подано в додатку дисертації.

Третій розділ стосується викладення результатів власних досліджень структури поверхневих атомних шарів золота, міді, алюмінію та кремнію за температур поблизу точки плавлення та здійснено її порівняння з структурою об'ємних матеріалів. Для дослідження поверхневої структури матеріалів використано поверхневі парні кореляційні функції, та розподіли координаційних чисел для атомних шарів на різній відстані до поверхні. Також вивчено розподіл вільного об'єму залежно від глибини розміщення атомного шару.

В **четвертому розділі** наведено результати молекулярно-динамічних досліджень формування атомної структури та атомного складу на межі метал-кремній. Метали, які було обрано для досліджень (Au, Cu, Al), найчастіше є складовими конструкційних матеріалів а також елементів електроніки. Для аналізу перехідного шару «метал-кремній» було використано профілі концентрації та густини залежно від температури та часу моделювання. Для досліджених систем встановлено роль евтектичних реакцій у випадку дифузійного перемішування фаз на межі контакту метал-кремній. Результати моделювання порівнювали з фазовим складом відповідних сплавів у рівноважному стані.

П'ятий розділ стосується обчислення деяких властивостей матеріалів на межі фаз для однокомпонентних матеріалів. Зокрема, обчислено коефіцієнти теплопровідності а також поверхневу енергію.

Загальні **висновки** за результатами дисертаційної роботи відображають одержані автором результати, розкривають її наукову та практичну значимість.

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

Дисертаційну роботу написано грамотно, послідовно та логічно. Достовірність результатів проведеного дисертаційного дослідження забезпечують: теоретичне та методологічне обґрунтування вихідних положень дослідження, відображених у сформульованій меті й завданнях, які впливають з неї, застосування сучасного програмного забезпечення, адекватного об'єкту дослідження згідно з поставленим завданням. Рукопис дисертації є завершеною науковою роботою, написаний українською літературною науковою мовою. Наведені в дисертаційній роботі результати узгоджуються з існуючими положеннями фізики твердого тіла та літературними даними.

Дискусійні положення й зауваження щодо змісту та оформлення дисертації.

Незважаючи на загальне позитивне враження від роботи, можна виділити низку зауважень і побажань.

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, виникає питання, чи автор вивчає межу розділу в рівноважних умовах?
3. У 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.

Незважаючи на висловлені зауваження, вони жодною мірою не знижують загальної позитивної оцінки поданого дисертаційного дослідження, не стосуються новизни роботи, її практичного та фундаментального значення та основних висновків роботи.

Загальний висновок про відповідність роботи встановленим вимогам.

Дисертація «Вивчення процесів фазоутворення на межі рідина–кристал в нанокмпозитах з металевою матрицею» є завершеним науковим дослідженням і містить результати, які є важливими в галузі фізики металів. Вирішені в дисертації наукові задачі, обсяг достовірних результатів отриманих методом моделювання, рівень інтерпретації результатів, обґрунтованість наукових положень та практичних рекомендацій відповідають 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), зокрема, 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 також вимогам, передбаченим пунктом 2 Вимог до оформлення дисертацій, затверджених Наказом Міністерства освіти і науки України від 12.01.2017 р. № 40, а її автор – Плечистий Валерій Станіславович – заслуговує присудження ступеня доктора філософії з галузі знань 10 Природничі науки за спеціальністю 104 Фізика та астрономія.

Офіційний опонент:

завідувач кафедри прикладної
математики Національного
університету «Львівська політехніка»,
доктор фізико-математичних наук,
професор

Богдан МАРКОВИЧ