

ВИСНОВОК

**про наукову новизну, теоретичне і практичне значення
результатів дисертації Ташука Романа Юрійовича на тему:
«Деформація анізотропних кристалів з різко нелінійними механічними
властивостями в умовах обмеженої релаксації напружень»,
поданої на здобуття ступеня доктора філософії
за спеціальністю 104 – Фізика та астрономія
в галузі знань 10 - Природничі науки**

1. Обґрунтування вибору теми дослідження та її зв'язок із планами наукових робіт Університету.

Матеріали, які при деформації проявляють різко нелінійні властивості – розбухають у всіх напрямках при розтязі та тверднуть при стискуванні – сьогодні називають ауксетиками. Така поведінка при деформації зумовлена шарнірно-подібною структурою молекул (для кристалічних ауксетиків) або структурних елементів у ауксетичних конструкціях. Однак фізична природа явища та механізми виникнення ауксетичних властивостей матеріалів практично не вивчені і потребують детальних досліджень.

Ауксетичні матеріали внаслідок унікальних деформаційно–міцнісних властивостей знаходять широке застосування для виготовлення ударно-поглинаючих і сейсмічно стійких конструкцій, засобів захисту і фільтрів, а також різноманітних приладів і пристроїв функціональної акусто-оптоелектроніки. Для дослідження природи ауксетичності кристалічні ауксетики зручно використовувати у якості модельних, так як теорія деформації кристалічних твердих тіл на сьогодні розроблена значно краще, ніж композитних конструкцій. При цьому слід зауважити практичну відсутність інформації про ауксетичні властивості кристалів низької категорії, особливо моноклінних і триклинних, хоча саме серед них через високу анізотропію їх механічних властивостей слід очікувати появу матеріалів з екстремально великими значеннями коефіцієнтів Пуассона, близькими до

значень монтажних пінок. На сьогодні в науковій літературі мало інформації про роль типу кристалічної структури, хімічного зв'язку і дефектів будови у формуванні ауксетичної поведінки кристалів.

Дослідження, представлені у дисертаційній роботі, виконані відповідно до програм наукової тематики кафедри інформаційних технологій та комп'ютерної фізики Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича, зокрема: «Структура і фізико-механічні властивості, деформації та механізми дефектоутворення у різних конденсованих середовищах: монокристалах, полікристалах, композитних матеріалах і нанорозмірних структурах» (2016–2020 рр.) (№ держреєстрації 0116U006147) та «Виявлення, характеристика та візуалізація порушень кристалічної структури функціональних матеріалів та їх фізичні властивості» (2022-2026) (№ держреєстрації 0122U201550)

Метою роботи є дослідження особливостей формування ауксетичних властивостей у анізотропних кристалах з різним типом хімічного зв'язку і кристалічної будови у широкому інтервалі температур, напрямків у кристалі та концентрацій (для сплавів) з метою виявлення можливих механізмів їх пружної та пластичної аномальної деформації.

Методи дослідження:

Методи фізичної акустики для вивчення поширення і згасання УЗ хвиль у різних кристалографічних напрямках, методи ІТ комп'ютерної обробки отриманих величин для визначення модулів пружності, податливості та коефіцієнтів Пуассона.

Об'єктом дослідження є поліморфні модифікації діоксиду кремнію: α - і β - кварц, α - і β - кристобаліт та метастабільні надтверді модифікації діоксиду кремнію – коесит і стишовіт, яким притаманні іонно-ковалентний тип зв'язку між атомами та практично всі кристалічні структури від кубічної до тригональної. Монокристали моноклінних лабрадориту, дигідрату сульфату кальцію, оксиду цирконію, флуорододекану, дигідрофосфату цезію, ніобату лантану, нафталену, бензоциклооктатетраену. антрацену та бібензилу з

різними типами хімічного зв'язку. Інтерметалічні сполуки сплавів Ag-Au, Cu-Ni, Cu-Au, Cu-Zn та Cu-Mn, що володіють металевим типом зв'язку та належать до кристалів вищої (кубічної) категорії. 2-D мікро- наношари індію в умовах жорсткої термоциклічної деформації

Предметом є основні характеристики ауксетичності в моно- і полікристалах, а також в 2D кристалічних наношарах матеріалів в широких температурних і концентраційних інтервалах, що охоплюють фазові перетворення 1-го та 2-го роду.

2. Формулювання наукового завдання, нове розв'язання якого отримано в дисертації

Наукове завдання полягає: із використанням методів фізичної акустики та ІТ технологій обробки експериментальних результатів на базі теорії пружності для анізотропних кристалів створено програми, які дозволять побудувати характеристичні поверхні модулів Юнга, кутові розподіли коефіцієнтів Пуассона та вказівні поверхні ауксетичності для монокристалів довільної сингонії. Вивчено закономірності та механізми формування характеристичних поверхонь для матеріалів, що зазнають поліморфних перетворень, володіють однаковим типом хімічного зв'язку, але різною кристалографічною структурою. Досліджено анізотропію для монокристалів, що належать до моноклінної сингонії, але мають різні типи хімічного зв'язку, окрім металевого. Встановлено екстремальні значення модулів Юнга, коефіцієнтів Пуассона та механізми і закономірності формування вказівних поверхонь ауксетичності. Встановлено взаємозв'язок між ступенем ауксетичності у монокристалах деяких інтерметалічних сполук, що мають однаковий тип хімічного зв'язку і однакову кристалографічну структуру, та вивчено концентраційні і температурні залежності основних характеристик ауксетичності в них. Вивчено вплив обмеженого простору та інтенсивних термоциклічних деформацій у різних кристалографічних напрямках на деформацію розтягу/стиску в 2D наношарах квазіанізотропного ауксетика з металевим типом зв'язку. Досліджено особливості поведінки лінійних

дефектів та їх комплексів з точковими дефектами в ауксетичних і звичайних напрямках у кристалах з частковим (змішаним) типом ауксетичності та різним типом хімічного зв'язку.

Це нове завдання було повністю розв'язано у дисертації.

3. Наукові положення, розроблені особисто дисертантом, та їх новизна:

- Дисертант здійснив моделювання та аналізом деформацій, що виникають в шарах індію у різних кристалографічних напрямках при жорсткому термоциклюванні від кімнатних до криогенних температур.

- Самостійно вперше дослідив вплив деформації та анізотропії пружних констант на основні ауксетичні характеристики стабільних і метастабільних поліморфних модифікацій діоксиду кремнію (альфа та бета кварцу, альфа та бета кристобаліту, коеситу і стишовіту)

- Дисертант вперше самостійно в рамках теорії дислокацій проаналізував особливості поведінки лінійних дефектів та їх об'єднань з точковими дефектами (вакансіями та міжвузловими атомами) в ауксетичних і звичайних (неауксетичних) напрямках у кристалах.

На всіх етапах досліджень нових задач і розробки нових методів дисертант приймав активну участь. Ним здійснено ґрунтовний аналіз отриманих результатів та сформовано висновки до кожного розділу дисертації.

4. Обґрунтованість і достовірність наукових положень, висновків і рекомендацій, які захищаються.

Точність визначення швидкостей поширення повздожніх і поперечних ультра-звукових хвиль, а відповідно і компонент модулів пружності забезпечувалась використанням стандартизованих кварцових (SiO_2) і ніобатлітієвих (LiNbO_3) кристалів-перетворювачів X - та Y -зрізів та використанням в якості частоти заповнення резонансної частоти кристалу випромінювача із ніобату літію із стандартною орієнтацією зрізу « $X + 36^\circ$ » – для повздожньої ультразвукової хвилі. Розміри зразків l вимірювались з

точністю $\pm 0,01$ мм на оптиметрі ИЗВ–2 та мікрометрі фірми Mitutoyo. Плоскопаралельність робочих граней зразків досягалася обробкою абразивами на спеціальному пристрої та контролювалася на профілометрі. Відносна похибка для визначення діагональних компонент тензора модуля пружності становила 0,1 - 0,7% для крупних монокристалів, а для недіагональних компонент – 1-3%. Це обумовлено тим, що при визначенні швидкостей квазіповздовжних і квазіпоперечних акустичних хвиль до похибок, що виникають при їх вимірюванні додаються похибки при визначенні кутів некристалографічних зрізів. Критерієм правильності отриманих результатів є перевірка модулів пружності на їх самоузгодження.

Дисертація складається з вступу, п'яти розділів, висновків до розділів, загальних висновків та списку використаних джерел. Дисертаційна робота є самостійною науковою працею. Висновки, рекомендації та пропозиції, що характеризують, зокрема, наукову новизну дослідження, сформовані автором дисертації. Публікації (5 статей) у наукових журналах з теми дисертації висвітлюють проблематику та основні положення наукової роботи. Апробація основних результатів дисертації відбулася у формі доповідей на 11 наукових конференціях.

5. Рівень теоретичної підготовки здобувача та рівень його обізнаності з результатами наукових досліджень інших учених високий. Це видно, як з великої кількості використаних для огляду журнальних статей, так із доповіді матеріалів дисертації.

Щодо особистого внеску здобувача у розв'язання конкретного наукового завдання, то він також достатньо високий. Зокрема:

- досконало вивчив українську й закордонну наукову літературу за темою дисертації

- дисертант самостійно оволодів методикою складних комп'ютерних розрахунків, освоїв сучасні математичні методи фізичної акустики та ІТ технологій обробки експериментальних результатів на базі теорії пружності для анізотропних кристалів фізики.

- дисертант брав участь в обговоренні постановки задачі, визначенні мети роботи, виборі методів досліджень та у підготовці матеріалів до публікації у наукових журналах, представленні на наукових конференціях із доповіддю отриманих результатів.

- навчився чітко виконувати як індивідуальні так і колективні наукові дослідження.

- приймав активну участь на всіх етапах дослідження деформації анізотропних кристалів з різко нелінійними механічними властивостями.

6. Наукове та практичне значення роботи.

Отримані в роботі результати моделювання поверхонь коефіцієнтів Пуассона, поверхонь ауксетичності та ступеню ауксетичності для анізотропних кристалів дозволяють прогнозувати поведінку цих матеріалів при їх використанні на практиці, зокрема, у конструкціях з високими ударно-енергетичними та сейсмічностійкими характеристиками. Для дослідження природи ауксетичності кристалічні ауксетики зручно використовувати у якості модельних, так як теорія деформації кристалічних твердих тіл на сьогодні розроблена значно краще, ніж композитних конструкцій.

Розроблені підходи для дослідження зміни характеру деформації тонких мікро-наношарів у залежності від температури і напрямків у кристалах при жорсткому термоциклюванні в умовах відкритого космосу можуть бути використані для вирішення проблеми надійності індієвих мікроконтактів як у фліп-чіпах, і, особливо 2D-наноконтактів, які використовуються у датчиках гравітаційних хвиль.

7. Повнота викладу матеріалів дисертації в публікаціях та особистий внесок здобувачки в публікації.

Особистий внесок здобувача Дисертант брав активну участь у постановці задач, обговоренні та інтерпретації результатів в усіх опублікованих у співавторстві робіт. Займався моделюванням і аналізом деформації, що виникає в шарах індію у різних кристалографічних напрямках при жорсткому термоциклюванні від кімнатних до криогенних температур.

Проводив основні розрахунки, здійснював аналіз отриманих результатів, займався вдосконаленням програмного забезпечення. Результати дисертації доповідались і обговорювались на міжнародних і всеукраїнських наукових конференціях.

Результати перевірки тексту дисертації з використанням антиплагіатної системи UNICHECK показав на 8.49% схожості з джерелами з Інтернету. Робота відповідає принципам академічної доброчесності.

Основні положення і висновки дисертаційної роботи викладені у 5 наукових працях. Зокрема, 4 індексовані у Scopus (одна Q=3).

Матеріали дисертації доповідалися і опубліковані у 11 тезах доповідей на всеукраїнських і міжнародних наукових конференціях.

Результати дисертації повною мірою викладені в зазначених публікаціях.

Наукові праці у виданнях, включених до переліку наукових фахових видань України

1. Raranskyi M.D., Oliinych-Lysiuk A.V., Kurek I.G., Tkach O.O., Tashchuk R.Yu., Lysiuk O.V. Features of Thermoplastic Deformations of Quasi-Anisotropic 2D Layers of Indium. *Metallophysics and Advanced Technologies*. 2020. Vol. 42, no. 7. P. 1015–1027. DOI: <https://doi.org/10.15407/mfint.42.07.1015> **(Фахове видання)**

Наукові праці у виданнях, включених до переліку наукових фахових видань України та проіндексовані у наукометричній базі даних Scopus

2. Раранський М.Д., Олійнич-Лисюк А.В., Ташук Р.Ю., Лисюк О.В., Ташук О.Ю. Особливості деформації в кристалах ін у широкому інтервалі температур / Features of Deformation in Crystals of Indium in a Wide Range of Temperatures. // *Металлофізика и новейшие технологии*. 2018. Т. 40. №11. С.1453-1463. DOI: <https://doi.org/10.15407/mfint.40.11.1453> **(Фахове видання, Scopus)**

3. Раранський М.Д., Олійнич-Лисюк А.В., Ташук Р.Ю., Ташук О.Ю., Струк А.Я, Унгуриян М.А. Ауксетичні властивості деяких інтерметалічних сполук / Auxetic properties of some intermetallic compounds. *Фізика і хімія*

твердого тіла / Physics and Chemistry of Solid State. 2022. Vol. 23, no. 4. P. 764-775. DOI: <https://doi.org/10.15330/pcss.23.4.764-775> (Фахове видання, Scopus)

Наукові праці у періодичних наукових виданнях, проіндексованих у наукометричній базі даних Scopus:

4. Raranskiy M.D., Oliynych-Lysiuk A.V., Tashchuk R.Yu., Struk A.Ya., Tashchuk O.Yu., Hulyk S. V. Auxetic properties of silicon dioxide single crystals. *SPIE*. 2021, Vol. 12126. ISSN: 0277-786X (Scopus)

Публікації, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

1. Oliynich-Lysiuk A.V., Tashchuk O.Yu., Tashchuk R.Yu., Raransky M.D. Research features of deformation of nano-microcrystalline auxeticsю. The International research and practice conference “Nanotechnology and Nanomaterials” (NANO-2017). Abstract Book (Chernivtsy, 23-26 August 2017) / Edited by Dr. Olena Fesenko. - Kiev: SME “Burlaka”, 2017. P. 758.

2. Раранський М.Д., Олійнич-Лісюк А.В., Ташук Р.Ю., Лісюк О.В., Ташук О.Ю. Дослідження процесів деформації в кристалах Іп у широкому інтервалі температур. Materials of vi international scientific - practical conference «Structural relaxation in solids» (Vinnitsia, 22 - 24 May 2018)/ Vinnitsia, 2018. P. 23-25.

3. Олійнич-Лісюк А.В., Раранський М.Д., Ташук О.Ю., Ташук Р.Ю., Лісюк О.В. Особливості деформації мікрокристалічного Індію в широкому інтервалі температур. III Всеукраїнська науково-практичній конференція «Перспективні напрямки сучасної електроніки, інформаційних і комп'ютерних систем» (MEICS-2018): матеріали Всеукр. наук.-практ. конф., Дніпро, 21-23 листопада 2018. Дніпро, 2018. С. 196-197.

4. Raransky M.D., Tashchuk R.Yu., Kurek I.G., Oliynich-Lysiuk A.V. Thermoplastic Properties of Quasi-Isotropic Indium Layers. XVII International Freik Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems. Materials. / Ed. By Prof. V.V. Prokopiv. Ivano Frankivsk: Publisher Vasyl Stefanyk Precarpathian National University, 2019. P. 257.

5. Раранський М.Д., Олійнич-Лісюк А.В., Курек І.Г., Ташук Р.Ю., Ташук О.Ю. Про інверсію знаку деформації в шарах Іп. II Міжнародна конференція

“Функціональні матеріали для інноваційної енергетики” (ФМІЕ-2020): матеріали Міжнар. конф., Київ, 25-27 травня 2020. Київ, 2020. С. 50.

6. Tashchuk R.Yu., Raransky N.D., Oliynych-Lysiuk A.V., Kurek I.G., Tashchuk O.Yu. Change of mechanism of thermoplastic deformation in Indium nanolayers. The International research and practice conference “Nanotechnology and Nanomaterials” (NANO-2020): Abstract Book of participants of the International research and practice conference (Lviv, 26 – 29 August 2020) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC «Computer-publishing, information center», 2020. P. 24.

7. Raransky M.D., Oliynych-Lysiuk A.V., Kurek I.G., Tashchuk O.Yu., Tashchuk R.Yu. Conversion of auxetics into an ordinary crystal in the process of plastic deformation of the indium- nanolayers. “Clusters and Nanostructured Materials” (CNM-6): Materials of the International Meeting, Uzhgorod, 5 – 9 October 2020. Uzhgorod, 2020. P. 167-169.

8. Раранський М.Д., Олійнич-Лісюк А.В., Курек І.Г., Ташук Р.Ю. До питання про природу термопластичної деформації тонких неауксетичних і ауксетичних шарів індію. V Всеукраїнська науково-практична конференція «Перспективні напрямки сучасної електроніки, інформаційних і комп'ютерних систем» (MEICS-2020): матеріали наук.-практ. конф., Дніпро, 25-27 листопада 2020. Дніпро, 2020. С. 193-194.

9. Раранський М.Д., Олійнич-Лісюк А.В., Ташук Р.Ю., Ташук О.Ю. Про особливості релаксації механічних напружень в частково ауксетичних матеріалах у процесі їх пластичної деформації. VII Міжнародна науково-практична конференція “СТРУКТУРНА РЕЛАКСАЦІЯ У ТВЕРДИХ ТІЛАХ”: матеріали наук-практ. конф., Вінниця, 25-27 травня 2021. Вінниця, 2021. С.14.

10. Раранський М.Д., Олійнич-Лісюк А.В., Ташук Р.Ю., Ташук О.Ю. Про можливий механізм релаксації руйнівних напружень у частково ауксетичних матеріалах. “Функціональні матеріали для інноваційної енергетики” (ФМІЕ-2021): матеріали Міжнар. конф., Київ, 25–27 травня 2021. Київ, 2021. С. 40.

11. Раранський М.Д., Олійнич-Лісюк А.В., Ташук Р.Ю., Ташук О.Ю. Особливості поведінки лінійних дефектів у реальних частково ауксетичних матеріалах. III Всеукраїнська конференція: молодих учених “Сучасне

матеріалознавство. матеріали та технології” (СММТ-2021): матеріали Всеукр. конф., Київ, 19-20 жовтня 2021. Київ, С. 47.

8. Апробація матеріалів дисертації здійснювалася на таких конференціях:

1. 5th International research and practice conference «Nanotechnology and Nanomaterials» (NANO-2017), 23-26 August 2017, Chernivtsy, Ukraine.

2. VI INTERNATIONAL SCIENTIFIC - PRACTICAL CONFERENCE «STRUCTURAL RELAXATION IN SOLIDS» May 22 - 24, 2018 Vinnitsia, Ukraine.

3. III Всеукраїнська науково-практична конференція «Перспективні напрямки сучасної електроніки, інформаційних і комп'ютерних систем (MEICS-2018)», 21-23 листопада 2018, Дніпро, Україна.

4. XVII International Freik Conference Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems. 20-25 May, 2019, Ivano Frankivsk, Ukraine.

5. Функціональні матеріали для інноваційної енергетики, ФМІЕ-2020, 25-27 травня, 2020 року, Київ, Україна.

6. 8th International research and practice conference «Nanotechnology And Nanomaterials» (NANO-2020), 26-29 August, 2020, Lviv, Ukraine.

7. 6 Міжнародна конференція «Кластерні та наноструктурні матеріали» (CNM-6), 5 - 9 жовтня, 2020, Ужгород, Україна.

8. V Всеукраїнська науково-практичній конференція «Перспективні напрямки сучасної електроніки, інформаційних і комп'ютерних систем» (MEICS-2020), 25-27 листопада, 2020, Дніпро, Україна.

9. VII МІЖНАРОДНА НАУКОВО-ПРАКТИЧНА КОНФЕРЕНЦІЯ «СТРУКТУРНА РЕЛАКСАЦІЯ У ТВЕРДИХ ТІЛАХ» 25 - 27 травня, 2021, Вінниця, Україна.

10. Функціональні матеріали для інноваційної енергетики, ФМІЕ-2021, 25-27 травня, 2021 року, Київ, Україна.

11. III Всеукраїнська конференція: молодих учених “Сучасне матеріалознавство. матеріали та технології” (СММТ-2021), 19-20 жовтня, 2021, Київ, Україна.

9. Оцінка мови і стилю дисертації.

Мова і стиль дисертації відповідають вимогам, що висуваються до праць такого рівня.

10. Відповідність змісту дисертації спеціальності з відповідної галузі знань, з якої вона подається до захисту.

Зміст дисертації відповідає чинним вимогам до оформлення дисертації, встановленим освітньо-науковою програмою «Фізика та астрономія» галузі знань 10 Природничі науки, спеціальності 104 Фізика та астрономія.

11. Дотримання нормативних вимог щодо оформлення дисертації.

Нормативні вимоги щодо оформлення дисертації дотримані повністю.

12. Рекомендації дисертації до захисту.

Дисертаційна робота Ташука Романа Юрійовича «Деформація анізотропних кристалів з різко нелінійними механічними властивостями в умовах обмеженої релаксації напружень», подана на здобуття ступеня доктора філософії у галузі знань 10 - Природничі науки за спеціальністю 104 – Фізика та астрономія за її актуальністю, науково-теоретичним рівнем, новизною постановки та розв’язання проблеми, практичним значенням отриманих результатів відповідає вимогам пунктів 6, 7, 8, 9 «Порядком 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 від 12 січня 2022р. №44 (із змінами, внесеними згідно з Постановою Кабінету Міністрів України №431 від 21.03.2022 р.). За результатами публічної презентації результатів дисертації та їх обговорення на засіданні кафедри інформаційних технологій та комп’ютерної фізики Інституту фізико-технічних та комп’ютерних наук Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича 20 вересня 2023 року дисертацію Ташука Романа

Юрійовича рекомендовано до захисту в разовій спеціалізованій вченій раді
для здобуття ступеня доктора філософії

Голова засідання,
професор кафедри
Інформаційних технологій
та комп'ютерної фізики
Чернівецького національного
університету імені Юрія Федьковича,
доктор фізико-математичних наук,
професор

Юлія СЕГІ

Підпис *Семі Ю.* завідувачу
Ученій секретар Чернівецького національного
університету імені Юрія Федьковича
Семі Ю.
09