Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0823U101889

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 19-12-2023

Статус: Наказ про видачу диплома

Реквізити наказу МОН / наказу закладу: Наказ Ректора Львівського національного університету імені Івана Франка від 12.01.2024 р. № 42

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Плечистий Валерій Станіславович
2. Valeriy S. Plechystyy

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCHID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 104

Назва наукової спеціальності: Фізика та астрономія

Галузь / галузі знань: природничі науки

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Фізика та астрономія

Дата захисту: 26-12-2023

Спеціальність за освітою: Фізика

Місце роботи здобувача:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Сектор науки: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 35.051.127_ID 3045

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Університетський

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Університетський

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 29.17.27, 29.19.04, 29.19.15

Тема дисертації:

1. Вивчення процесів фазоутворення на межі рідинакристал в нанокомпозитах з металевою матрицею.
2. Study of phase formation processes at the liquid-crystal interface in metal matrix nanocomposites.

Реферат:

1. У дисертаційній роботі проведено аналіз структури та властивостей міжфазної границі в однокомпонентних та двокомпонентних системах за допомогою методу молекулярної динаміки (МД). Для моделювання використовувався класичний підхід МД з використанням пакету LAMMPS, при цьому взаємодія між атомами була задана за допомогою потенціалів, отриманих за методом зануреного атома чи модифікованим методом зануреного атома. Отримані результати аналізувались за допомогою як вже існуючих, так і розроблених авторами комп'ютерних алгоритмів та програм. З використанням результатів моделювання та їхнього аналізу було проведено дослідження структури тонких шарів в області міжфазної границі вивчених матеріалів. Для цього використовувалися тривимірні та двовимірні парні кореляційні

функції, а також параметри, отримані на їхній основі. Міжфазну границю аналізували за допомогою профілю атомної густини та атомної концентрації для двокомпонентних систем. У випадку однокомпонентних матеріалів було обчислено поверхневу енергію та запропоновано метод обчислення коефіцієнта температуропровідності та теплопровідності. Дослідження проводились на матеріалах, що широко використовуються в сучасних технологіях, зокрема, мідь, алюміній, золото та кремній. Також була розглянута двокомпонентна комбінація зазначених металів та кремнію.

2. In this thesis, the structure and properties of the interfacial boundary in one-component and two-component systems were analysed using the molecular dynamics (MD) method. The classical MD approach was used for modelling with the LAMMPS package, while the interaction between atoms was set using potentials obtained by the immersed atom method or a modified immersed atom method. The results obtained were analysed using both existing and computer algorithms and programs developed by the authors. Using the results of modelling and their analysis, the structure of thin layers in the area of the interfacial boundary of the studied materials was investigated. For this purpose, three-dimensional and two-dimensional pairwise correlation functions were used, as well as parameters obtained on their basis. The interfacial boundary was analysed using the atomic density and atomic concentration profiles for two-component systems. In the case of one-component materials, the surface energy was calculated and a method for calculating the thermal conductivity and thermal diffusivity was proposed. The research was carried out on materials widely used in modern technologies, including copper, aluminium, gold and silicon. A two-component combination of these metals and silicon was also considered.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Нові речовини і матеріали

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Освоєння нових технологій виробництва матеріалів, їх оброблення і з'єднання, створення індустрії наноматеріалів та нанотехнологій

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- 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.
- 2. V. Plechystyy, I. Shtablavyi, K. Rybacki, S. Winczewski, S. Mudry, J. Rybicki. Surface diffusion and cluster formation of gold on the silicon (111) // Journal of Achievements in Materials and Manufacturing Engineering. -2020. -V. 101(2). -P. 49 - 59.
- 3. 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.
- 4. V. Plechystyy, I. Shtablavyi, S. Winczewski, K. Rybacki, B. Tsizh, S. Mudry, J. Rybicki. Effect of heat treatment on the diffusion intermixing and structure of the Cu thin film on Si (111) substrate: a molecular dynamics simulation study// Molecular Simulation. -2021. -V. 47(17). -P. 1381-1390.
- 5. 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 Diffusion. -2022. -V. 43. -P. 256-265.
- 6. I. Shtablavyi, V. Plechystyy, B. Tsizh, S. Mudry, Structure and free volume distribution in Bi-Zn liquid alloys // Journal of Physical Studies. -2020. -V. 24(4). -P. 4601 – 4609.
- 7. I. Shtablavyi, O. Kovalskyi, V. Plechystyy, Yu. Pashko, S. Mudry. Modification of the atomic structure of liquid Al0.973Ni0.027 eutectic alloy by carbon nanotubes // Фізика і хімія твердого тіла. -2020. -V. 21(2). -P. 204-210.

- 8. В. Плечистий, С. Мудрий, М. Дуфанець, І. Штаблавий. Метод капілярних флуктуацій та поверхнева енергія на межі рідина кристал // Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології. -2022. -В. 34-35. -С. 46-50.
- 9. Плечистий В. Штаблавий І. Дослідження структури рідкого вісмуту методом молекулярної динаміки // Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЕВРИКА–2017 Львів, 16-18 травня С. А-17.
- 10. Shtablavyi I. Mudry S., Rybicki J., Plechysty V., Winczewski S. Molecular Dynamic Simulations of Solid-Liquid Interface in Bi-Ni System // Joint conferences on advanced materials and technologies: The 14th Conference on Functional and Nanostructured Materials FNMA'17; The 7th International Conference on Physics of Disordered Systems PDS'17 25–29 September 2017 Lviv & Yaremche, Ukraine P 144.
- 11. Shtablavyi I. Plechystyy V., Mudry S. et all. Temperature-induced changes of the structure and free volume of liquid bismuth // International Conference PLMMP-2018 Kyiv May 18-22 2018 P. 64.
- 12. V. Plechystyy, I. Shtablavyi, S. Winczewski, K. Rybacki, S. Mudry, J. Rybicki Phase formation and structure of the Cu thin film interlayer on Si(111) substrate: a molecular dynamics simulation study // International research and practice conference "Nanotechnology and nanomaterials" 27-30 August 2019 Lviv, Ukraine, P. 164.
- 13. V. Plechystyy, I. Shtablavyi, S. Winczewski, K. Rybacki, S. Mudry, J. Rybicki Molecular dynamics simulations of interlayer structure between Au thin film and Si-substrate // The 16th Conference on Functional and Nanostructured Materials FNMA'19, 31 August–7 September 2019 Athens and Agri Teodori, Greece P. 64.
- 14. V. Plechystyy, I. Shtablavyi, S. Winczewski, K. Rybacki, S. Mudry, J. Rybicki Molecular dynamic simulations of silicides formation at the interlayer boundary of Cu-Si system // XIV International Conference on Crystal Chemistry of Intermetallic Compounds, September 22-26, 2019, P. 9.
- 15. І. Штаблавий, Б. Соколюк, В. Плечистий, С. Мудрий Структура рідкометалевих композитів на основі евтектики Al0,973Ni0,027 з вуглецевими нанотрубками // МатеріалиVI міжнародної наукової конференції "Фізика невпорядкованих систем". – Львів, Україна. – 16 жовтня 2018р. – с. 2998-8.
- 16. Shtablavyi I. Plechystyy V., Mudry S. Molecular dynamic simulations of the interlayer structure at the boundary of metal-silicon system // XXII International Seminar on Physics and Chemistry of Solids. – June 17-19, 2020 Lviv, Ukraine – P. 25.
- 17. Shtablavyi I. Plechystyy V., Tsizh B., Mudry S. Free volume distribution in Bi-Zn liquid alloys // XXII International Seminar on Physics and Chemistry of Solids. – June 17-19, 2020 Lviv, Ukraine – P. 81.
- 18. Plechystyy V., Shtablavyi I., Winczewski S., Rybacki K., Mudry S., Rybicki J. Evolution of the atomic composition and structure of the interfacial boundary in the aluminum-silicon system // XVII INTERNATIONAL FREIK CONFERENCE ON PHYSICS AND TECHNOLOGY OF THIN FILMS AND NANOSYSTEMS Ivano-Frankivsk, October 11-16, 2021 P. 111.

Наукова (науково-технічна) продукція: методи, теорії, гіпотези

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впровадження не планується

Зв'язок з науковими темами: №0119U002204, №0121U109730, №0122U001521

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Мудрий Степан Іванович

2. Stepan I. Mudry

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, 01.04.13

Ідентифікатор ORCHID ID: 0000-0003-1760-8840

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 8411877900; Web of Science Researcher ID: P-1607-2018; https://scholar.google.com/citations?hl=pl&user=EjBgNfcAAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Університетський

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гіржон Василь Васильович
2. Vasyl V. Hirzhon

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, 01.04.07

Ідентифікатор ORCHID ID: 0000-0002-9973-2214

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 7003792481; Web of Science Researcher ID: AIB-1298-2022; https://scholar.google.com/citations?hl=pl&user=-uFRjVMAAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Запорізька політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02070849

Місцезнаходження: вул. Жуковського, буд. 64, Запоріжжя, Запорізький р-н., 69063, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Університетський

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Маркович Богдан Михайлович
2. Bohdan M. Markovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, 01.04.02

Ідентифікатор ORCHID ID: 0000-0002-8813-9108

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 15022551200; Web of Science Researcher ID: C-5887-2016; https://scholar.google.com/citations?hl=pl&user=hUQQ-vgAAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, буд. 12, Львів, 79013, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Університетський

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Никируй Юлія Семенівна
2. Yulia S. Nykyruy

Кваліфікація: к. ф.-м. н., с.д., 01.04.13

Ідентифікатор ORCHID ID: 0000-0001-5808-0857

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 55382481900; Web of Science Researcher ID: M-1846-2019; https://scholar.google.com/citations?hl=en&user=GME2o9AAAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Університетський

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Королишин Андрій Володимирович
2. Andrii V. Korolyshyn

Кваліфікація: к. ф.-м. н., доц., 01.04.13

Ідентифікатор ORCHID ID: 0000-0002-2276-8745

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 6507106216; Web of Science Researcher ID: F-6176-2019; https://scholar.google.com/citations?hl=pl&user=ZtrvVI0AAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Університетський

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Плевачук Юрій Олександрович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Плевачук Юрій Олександрович
Відповідальний за підготовку облікових документів	Жак Ольга Володимирівна
Реєстратор	УкрІНТЕІ
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна