

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0825U002229

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 10-06-2025

Статус: Наказ про видачу диплома

Реквізити наказу МОН / наказу закладу: Наказ № 1025 від 02.07.2025 р.



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Попільовський Назар Богданович

2. Nazar B. Popilovskyi

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: 0009-0007-0981-7833

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: 16-06-2025

Спеціальність за освітою: Мікро- та наносистемна техніка

Місце роботи здобувача: 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:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): PhD 8907

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:

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:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 29.03.77, 29.41.01, 29.41.03

Тема дисертації:

1. Структурні особливості формування метастабільних фаз в неупорядкованих сплавах на основі елементів з високою щільністю упаковки.
2. Structural features of the formation of metastable phases in disordered alloys based on elements with high packing density.

Реферат:

1. У дисертаційній роботі дослідженню структури, кристалічних, аморфних і рідких сплавів алюмінієвих систем Al-V, Al-Hf, Al-Cu-Si, Zr-Cu-Al, Al-Zn, а також Fe-Cu-Si методами комп'ютерного моделювання та X-променевої дифракції. Основна увага зверталась на фундаментальні та прикладні аспекти аналізу структурних і фізико-хімічних характеристик досліджуваних сплавів, а також оптимізації методів їх моделювання для вирішення актуальних задач у галузі створення інноваційних матеріалів. Актуальність такого дослідження зумовлена необхідністю розвитку ефективних підходів до прогнозування властивостей складних багатокомпонентних систем, які широко використовуються в аерокосмічній, автомобільній, будівельній та електротехнічній промисловості. Зростаючий попит на легкі, міцні та корозійностійкі матеріали стимулює пошук нових сплавів алюмінію та інших металів з покращеними характеристиками. Комп'ютерне моделювання, як інструмент прогнозування властивостей матеріалів, відкриває нові

можливості для глибшого розуміння процесів, які визначають їхні експлуатаційні характеристики. Значна увага приділялась обґрунтованому вибору сучасних міжатомних потенціалів для опису взаємодій у системах на основі Al та Fe. Проведено аналіз можливостей методу для моделювання таких процесів, як фазові перетворення, дифузія атомів, кристалізація та аморфізація. Значну увагу приділено порівнянню результатів моделювання із експериментальними даними для систем Al-V, Al-Hf, Al-Cu-Si, Zr-Cu-Al, Al-Zn, Fe-Cu-Si, що дозволило верифікувати розроблені моделі. На основі проведених досліджень розроблено методику моделювання впливу температури та легуючих елементів на мікроструктуру та властивості складних алюмінієвмісних сплавів. Можливості цієї методики були перевірені й на залізовмісних сплавах. Виконано чисельні експерименти, які продемонстрували можливості управління структурними характеристиками матеріалів для досягнення оптимальних властивостей. Особливу увагу приділено дослідженню впливу нанорозмірних ефектів, що стають визначальними у випадку мікро- та наноструктурованих систем. Результати роботи включають встановлення ключових закономірностей, які визначають взаємозв'язок між мікроструктурою, фазовими станами та структурними характеристиками в рідкому стані сплавів на основі Al та оцінено їх можливості й для інших сплавів, зокрема на основі Fe. Отримано нові дані про механізми формування структурної стабільності та вплив термодинамічних параметрів на кластерну будову сплавів. Розроблені моделі дозволяють прогнозувати поведінку матеріалів в умовах значних експлуатаційних навантажень, включаючи високу температуру, корозійне середовище та радіаційний вплив. У дисертації також визначено перспективи подальших досліджень у сфері комп'ютерного моделювання систем на основі Al та Fe. Зокрема, рекомендовано шляхи з вдосконалення міжатомних потенціалів для більш точного опису складних багатокомпонентних систем із неоднорідною структурою, а також інтеграцію комп'ютерних методів для автоматизації аналізу даних моделювання.

2. In the thesis, the structure, crystalline, amorphous and liquid alloys of the aluminum systems Al-V, Al-Hf, Al-Cu-Si, Zr-Cu-Al, Al-Zn, and Fe-Cu-Si were studied by computer modeling and X-ray diffraction. The main attention was paid to the fundamental and applied aspects of analyzing the structural and physicochemical characteristics of the studied alloys, as well as optimizing methods of their modeling to solve urgent problems in the field of innovative materials. The relevance of this study is due to the need to develop effective approaches to predicting the properties of complex multicomponent systems that are widely used in the aerospace, automotive, construction, and electrical industries. The growing demand for lightweight, durable, and corrosion-resistant materials is driving the search for new alloys of aluminum and other metals with improved characteristics. Computer modeling, as a tool for predicting material properties, opens up new opportunities for a deeper understanding of the processes that determine their performance. Considerable attention was paid to the reasonable choice of modern interatomic potentials to describe interactions in Al and Fe-based systems. The capabilities of the method for modeling such processes as phase transformations, atomic diffusion, crystallization, and amorphization were analyzed. Considerable attention is paid to comparing the modeling results with experimental data for Al-V, Al-Hf, Al-Cu-Si, Zr-Cu-Al, Al-Zn, and Fe-Cu-Si systems, which allowed us to verify the developed models. Based on the research, a methodology for modeling the effect of temperature and alloying elements on the microstructure and properties of complex aluminum-containing alloys was developed. The capabilities of this methodology were also tested on iron-containing alloys. Numerical experiments have been performed to demonstrate the possibility of controlling the structural characteristics of materials to achieve optimal properties. Particular attention is paid to the study of the influence of nanoscale effects, which become crucial in the case of micro- and nanostructured systems. The results of the work include the establishment of key regularities that determine the relationship between microstructure, phase states, and structural characteristics in the liquid state of Al-based alloys and their applicability to other alloys, including Fe-based ones, is assessed. New data on the mechanisms of structural stability formation and the influence of thermodynamic parameters on the cluster structure of alloys were obtained. The developed models allow predicting the behavior of materials under significant operational loads, including high temperature, corrosive environment, and radiation exposure. The thesis also identifies prospects for further research in the field of computer modeling of Al and Fe-based systems. In particular, the ways to improve interatomic potentials for a more accurate description of complex

multicomponent systems with heterogeneous structures, as well as the integration of computer methods to automate the analysis of simulation data are recommended.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Нові речовини і матеріали

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Освоєння нових технологій високотехнологічного розвитку транспортної системи, ракетно-космічної галузі, авіа- і суднобудування, озброєння та військової техніки

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

1. Shtablavyi, I., Popilovskyi, N., Mudry, S., Poplavskiy, O. The structure of the Zr Cu-Al melts in the glass forming range of concentrations // Physics and Chemistry of Solid State. 2022. 23(2), pp. 416–423.
2. Shtablavyi, I., Popilovskyi N., Kulyk Yu., Serkiz R., Tsizh B., Mudry S. Formation of nanoscale phases during rapid solidification of Al-Cu-Si alloys // Applied Nanoscience (Switzerland), 2023, 13(11), pp. 7335–7347.
3. Shtablavyi I., Popilovskyi N., Nykyruy Yu., Mudry S. Selective laser sintering of amorphous nanoparticles: Molecular dynamics simulations // Physics and Chemistry of Solid State, 2024, 25(1), pp. 5–13.
4. Штаблавий І., Плечистий В., Попільовський Н., Кулик Ю., Сембратович Н., Мудрий С. Моделювання структури поверхні матеріалів на межі двох фаз // Журнал фізичних досліджень, 2024, Т.28, №1, 1601(7 с.)
5. Nykyruy Yu., Shtablavyi I., Mudry S., Kulyk Yu., Popilovskyi N., Kovalskiy O. Laser-sinterability of amorphous Fe-based powder // Journal of physical studies, 2025, 29(1), 1602(6 p.)
6. Shtablavyi I. Fabrication of Cu-based-CNT composites via electroplating and powder metallurgy techniques / Popilovskyi N., Kulyk Yu., Serkiz R., Tsizh B., Mudry S. // "Nanotechnologies and Nanomaterials" NANO-2022: Book of Abstracts Nano-2022, Lviv, Ukraine, 25-27 August 2022. – P. 187.
7. Shtablavyi I. Formation of nanoscale phases during rapid solidification of Al-Cu Si alloys / Shtablavyi I., Popilovskyi N., Kulyk Yu., Serkiz R., Tsizh B., Mudry S. // "Nanotechnologies and Nanomaterials" NANO-2022 : Book of Abstracts Nano 2022, Lviv, Ukraine, 25-27 August 2022. – P. 188.
8. Попільовський Н. Б. Молекулярнодинамічне моделювання та експериментальне дослідження структури потрійних розплавів системи Al- Cu-Si / І.І. Штаблавий, Ю. О. Кулик // Міжнародна наукова конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики “ЕВРИКА-2022”: Збірник тез доповідей, Львів, Україна, 18-20 жовтня 2022 р. – А23 (34).
9. Shtablavyi I. Peculiarities of primary nanocrystallization of Al-V and Al-Hf alloys / Popilovskyi N., Kulyk Yu., Sembratovych N., Serkiz R., Tsizh B., Mudry S. // "Nanotechnologies and Nanomaterials" NANO-2023 : Book of Abstracts Nano 2023, Bukovel, Ukraine, 16 - 19 August 2023 –P. 390.
10. Shtablavyi I. Molecular dynamics simulations of the surface structure of materials in liquid and solid-liquid state / Plechystyy V., Popilovskyi N., Kulyk Yu., Sembratovych N., Mudry S. // The 9th INTERNATIONAL CONFERENCE «Physics of Disordered Systems» (PDS'2023) : Збірник тез доповідей, Lviv, Ukraine, September 19-20, 2023 – P. 77.
11. I. Shtablavyi SELECTIVE LASER SINTERING OF Fe-BASED AMORPHOUS NANOPARTICLES: MOLECULAR DYNAMIC SIMULATION / I. Shtablavyi, N. Popilovskyi, Yu. Nykyruy, S. Mudry // XV International Conference on Crystal Chemistry of Intermetallic Compounds (IMC-XV) : Book of Abstracts, Lviv, Ukraine, SEPTEMBER 25-27, 2023 – P49 (97).
12. Shtablavyi I. Selective Laser Sintering of Amorphous Nanoparticles: Molecular Dynamics Simulations / Popilovskyi N., Nykyruy Yu., Mudry S. // Міжнародна Фреїківська конференція з фізики і технології тонких плівок і наносистем МКФТТПН-XIX : Збірник тез доповідей, Ivano-Frankivsk, Ukraine, 9-14 жовтня 2023 року – P. 75.

- 13. Попільовський Н. Б. Моделювання процесів фазоутворення в багатокомпонентних алюмінієвих сплавах / Н. Б. Попільовський, І. І. Штаблавий, С. І. Мудрий // IV Міжнародна науково-практична конференція КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ІНФОРМАЦІЙНИХ СИСТЕМ І ТЕХНОЛОГІЙ (КМПЗ_2024) : Збірник наукових праць (тези доповідей та вибрані статті), Львів - Чернівці, Україна, 30 трав. - 01 черв. 2024 р – УДК 388.26 (220-221).
- 14. Shtablavyi I. Formation of the Fe-based bulk amorphous composites by selective laser melting method. / I. Shtablavyi, Yu. Nykyruy, Yu. Kulyk, N. Popilovskyi, O. Kovalskyi, S. Mudry // 12th International Conference "Nanotechnologies and Nanomaterials" NANO-2024 , Uzhhorod, Ukraine, 21 - 24 August 2024 -P. 158.
- 15. Popilovskyi N. Formation of atomic structure in amorphous alloys of the Zr Cu-Al system during selective laser melting / N. Popilovskyi, I. Shtablavyi, N. Sembratovych, Yu. Kulyk, S. Mudry // 12th International Conference "Nanotechnologies and Nanomaterials" NANO-2024, Uzhhorod, Ukraine, 21 - 24 August - 2024. - P. 403.
- 16. Sembratovych N. Synthesis of thin amorphous films based on cobalt / N. Sembratovych, Yu. Nykyruy, N. Popilovskyi, Yu. Kulyk, S. Mudry // 12th International Conference "Nanotechnologies and Nanomaterials" NANO-2024 : A collection of abstracts of reports, Uzhhorod, Ukraine, 21 - 24 August - Uzhhorod, 2024.
- 17. Попільовський Н. Еволюція структури аморфних сплавів системи Zr-Cu Al у процесі їхнього формування методом лазерного плавлення / Н. Б. Попільовський, Н. В. Сембратович // Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЄВРИКА 2024: Збірник тез доповідей, Львів, Україна, 14-16 трав. 2024 р.- А14 (27).
- 18. Shtablavyi I. Molecular dynamics simulation of Zr-Cu-Al nanoparticles sintering/ I. Shtablavyi, N. Popilovskyi, S. Mudry, The 19 th Conference on Functional and Nanostructured Materials - FNMA 2024 21 & 23 November 2024, Gdansk, Poland.
- 19. Shtablavyi I. Molecular dynamics simulation of liquid-phase sintering of nanoparticles with high glass-forming ability / I. Shtablavyi, N. Popilovskyi, S. Mudry Advanced & Novel Technologies - Interdisciplinary Collaboration in Materials Science (ANTICM-2025) International Conference 25-27.02.2025 - Zaporizhzhia, Ukraine.

Наукова (науково-технічна) продукція: технології; матеріали

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами: № 0121U109730, № 0122U001521, № 0123U103614

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 ORCID 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:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Роїк Олександр Сергійович

2. Oleksandr S. Roik

Кваліфікація: д. х. н., професор, 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-9705-1100

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 6507005761; Web of Science Researcher ID: IZD-5918-2023;
<https://scholar.google.com/citations?user=vn4ZJRgAAAAJ>

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 60, Київ, 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Пацаган Тарас Миколайович

2. Taras M. Patsahan

Кваліфікація: д. ф.-м. н., с.д., 01.04.24

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-7870-2219

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 7801655813; Web of Science Researcher ID: V-8175-2017;
<https://scholar.google.com/citations?hl=uk&user=xX7KLoEAAAAJ>

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свенціцького, буд. 1, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Білик Роман Миколайович
2. Roman M. Bilyk

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-7740-4343

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 57216484141;
<https://scholar.google.com/citations?hl=uk&user=sbBaAtwAAAAJ>

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:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Герцик Оксана Мирославівна
2. Oksana M. Hertsyk

Кваліфікація: к. х. н., доц., 02.00.05

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-5243-4757

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 6603364236; Web of Science Researcher ID: S-9473-2017;
<https://scholar.google.com/citations?hl=uk&user=W8k4TeUAAAAJ>

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:

VIII. Заключні відомості

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові
голови ради**

Бігун Роман Іванович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові
головуючого на засіданні**

Бігун Роман Іванович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Жак Ольга Володимирівна

Реєстратор

УкрІНТЕІ

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**



Юрченко Тетяна Анатоліївна