

## Рецензія

кандидата фізико-математичних наук, доцента, асистента кафедри  
інформаційних технологій та комп'ютерної фізики  
Чернівецького національного  
університету імені Юрія Федьковича  
Гуцуляка Івана Івановича  
на дисертаційну роботу Ташука Романа Юрійовича  
на тему: **“Деформація анізотропних кристалів з різко нелінійними  
механічними властивостями в умовах обмеженої релаксації напружень”**,  
яка подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії в галузі знань  
10 Природничі науки за спеціальністю 104 Фізика та астрономія

### **Актуальність теми дослідження.**

Вперше існування мінералів з унікальними властивостями – від'ємними значеннями коефіцієнта Пуассона – було виявлене більше сотні років тому, хоча терміну ауксетик лише 30 років. На час відкриття такі вони не мали прикладного застосування, і лише значно пізніше науковці звернули увагу на величезний потенціал цієї групи матеріалів. Ауксетики володіють від'ємним коефіцієнтом Пуассона з надзвичайними показниками в'язкості, пружності, стійкості до зсуву та акустичних властивостей, головним чином завдяки особливостям будови та пов'язаній з ними механіці деформації. Важливо, що такі властивості притаманні не лише мінералам, а й синтезованим матеріалам зі спеціальною структурою. Завдяки цьому перспективи застосування охоплюють низку найрізноманітніших галузей – медицина, ракетобудування, цивільна інженерія, військові технології та інші. Наприклад, будівельні матеріали з використанням композитної ауксетичної піни можуть бути застосовані для поглинання енергії, ефективного гасіння вібрації та поглинання ударів, а текстильні вироби, унікальні властивості яких досягають шляхом використання спеціальних волокнистих матеріалів і введення ауксетичної геометрії в структуру під час ткацтва, в'язання чи виробництва нетканих матеріалів мають потенціал стати революційними в спортивній, автомобільній, морській галузях, біомедичній інженерії, для розробки засобів індивідуального захисту, тощо.

Активне дослідження існуючих матеріалів з ауксетичними характеристиками триває останні кілька десятиліть. Втім, і досі природа цього явища та механізми прояву властивостей ауксетиків не достатньо вивчені, а наявні теорії потребують доповнення для ефективного застосування. Доволі часто за основу для структурної моделі беруть кристалічні матеріали, оскільки теорія деформації для них є добре проробленою, на відміну від композитних матеріалів.

Дисертація висвітлює дослідження ряду ауксетичних характеристик моно-, полікристалів і 2D-кристалічних наночарів в рамках теорії пружності для анізотропних кристалів з використанням методів фізичної акустики. Здійснено аналіз закономірностей та механізмів формування цих характеристик в таких матеріалах з врахуванням типу хімічного зв'язку. Для обробки та інтерпретації результатів експериментальних вимірювань застосовано сучасні методи обробки масивів даних. Створено пакет програмного забезпечення для побудови

характеристичних поверхонь модулів Юнга, кутових розподілів коефіцієнтів Пуассона, вказівних поверхонь ауксетичності та визначення екстремальних значень коефіцієнтів Пуассона і ступеня ауксетичності для монокристалів довільної сингонії.

### **Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.**

Дослідження, описані в дисертації, проведені в рамках науково-дослідних робіт 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).

### **Структура і зміст дисертації**

Робота складається зі вступу, п'яти розділів, висновків до розділів, переліків використаних у розділах джерел, загальних висновків та додатку з переліком публікацій за темою дисертації.

**У вступі** обґрунтована актуальність теми дослідження, вказано його зв'язок з науковими програмами, планами та темами, сформульовано мету і завдання дисертації, висвітлено її наукове та практичне значення, аргументовано обґрунтованість і достовірність отриманих результатів, представлено інформацію про особистий внесок здобувача, апробацію результатів роботи, її структуру та обсяг.

**У першому розділі** коротко висвітлені основні положення теорії пружності для анізотропних кристалів усіх кристалічних категорій та її особливості для плівок та наночарів. Описані методи проведення експериментальних вимірювань, окремо увагу зосереджено на виявленні особливостей поведінки дефектів кристалічної будови.

**У другому розділі** викладено результати вивчення впливу деформації та анізотропії на основні ауксетичні характеристики поліморфних модифікацій діоксиду кремнію. Для них побудовані та проаналізовані характеристичні поверхні модулів Юнга, кутові розподіли та вказівні поверхні ауксетичності. Досліджено швидкості поширення акустичних хвиль у кристалах кремнезему у широкому інтервалі температур. В рамках теорії дислокацій проаналізовані особливості поведінки лінійних дефектів та їх об'єднань з точковими дефектами.

**У третьому розділі** з аналізу ауксетичних характеристик монокристалів кубічної, гексагональної, тетрагональної і ромбічної сингоній показано існування кристалів, що можуть досягти граничних від'ємних значень коефіцієнтів Пуассона, передбачених класичною теорією пружності для ізотропних середовищ. Побудовані та проаналізовані об'ємні зображення поверхонь модулів Юнга, кутових розподілів коефіцієнтів Пуассона та вказівних поверхонь ауксетичності для ряду моноклінних кристалів.

**У четвертому розділі** наведено вперше побудовані характеристичні поверхні модулів Юнга, кутові розподіли коефіцієнтів Пуассона та вказівні поверхні ауксетичності для монокристалів інтерметалічних сполук, таких як *Ag-Au*, *Cu-Ni*, *Cu-Au*, *Cu-Zn* і *Cu-Mn*. Для цього застосовано лінійну теорію

пружності анізотропних кристалів. Проаналізовано залежність складових та форми характеристичних поверхонь від аномальних деформацій при переупорядкуванні атомів кристалічної ґратки. Оцінено зміни кінематичних властивостей дефектів типу дислокацій і дислокаційних атмосфер при зміні концентрації точкових дефектів у звичайних і ауксетичних напрямках кристалів *Cu-Mn*.

У п'ятому розділі здійснено аналіз змін деформаційного стану наночарів індію як функції температури та кристалографічних напрямів у шарі в умовах жорсткого низькотемпературного термомеханічного циклування в інтервалі 2 – 300 К. Оцінено особливості виникнення в шарах індію таких механічних напружень, що накопичуватимуться в умовах обмежених простору та рухливості дислокацій при наднизьких температурах.

#### **Наукова новизна**

Результати та висновки, які наведені в дисертації Ташука Р. Ю. і складають наукову новизну, є такими:

- виявлені ауксетичні властивості у високо баричних надтвердих метастабільних монокристалах діоксиду кремнію – коеситу (моноклінна сингонія) та стишовіту (тетрагональна сингонія);

- побудовані характеристичні поверхні модулів Юнга, кутові розподіли коефіцієнтів Пуассона, вказівні поверхні ауксетичності сплавів, з яких визначені екстремальні значення  $\mu_{min}$  і  $\mu_{max}$  для інтерметалідів *Ag-Au*, *Cu-Ni*, *Cu-Au*, *Cu-Zn* та *Cu-Mn*;

- для сплавів *Cu-Ni* та *Cu-Mn* виявлено аномалії концентраційних залежностей усіх ауксетичних параметрів  $\mu_{min}(X)$ ,  $\mu_{max}(X)$  та  $S_a(X)$  поблизу точок фазового переходу другого (феромагнетик–парамагнетик) і першого (термопружне мартенситне перетворення) роду, відповідно;

- запропонований механізм релаксації механічних напружень у часткових (змішаних) ауксетичних кристалах  $\alpha$ -кварцу,  $\alpha$ -кристобаліту, *Cu-Mn* та в 2D-шарах індію в умовах обмеженої рухливості дислокацій (дислокаційних перегинів) вузькими ( $10^{-6}\text{м} - 10^{-8}\text{м}$ ) каналами підвищеної пластичності поблизу ядра дислокацій, які залягають у ауксетичних напрямках у кристалах, або виникають у напрямках, де  $\mu \geq 0,5$ .

**Обґрунтованість та достовірність** наукових положень, результатів і висновків дисертації забезпечені застосуванням добре пропрацьованого підходу до проведення ультразвукових вимірювань з врахуванням можливої похибки отриманих результатів, застосуванням теорії пружності та теорії дислокацій для аналізу поведінки дефектів та їх комплексів, послідовністю та логічністю аналітичних і числових розрахунків, кореляцією результатів роботи з граничними випадками та результатами інших експериментів. Основні результати дисертаційного дослідження висвітлені в 5,5 статтях у наукових журналах, 4 з яких індексуються в базах даних Scopus та/або WoS і широко апробовані на міжнародних наукових конференціях з публікацією тез чи матеріалів доповідей.

#### **Наукове та практичне значення роботи**

Результати та висновки дослідження мають практичне значення для подальшого розвитку розуміння особливостей поведінки ауксетичних структур

різного роду при нормальних та екстремальних умовах, розширюють розуміння проявів ауксетичності з урахуванням дислокаційної теорії та в умовах обмеженого простору. Запропонований у роботі механізм релаксації механічних напружень ряду часткових (змішаних) ауксетичних кристалів та наночарів може бути застосований при розвитку теорії ауксетичності таких об'єктів.

Окрім того, результати роботи можна використати у навчальному процесі для доповнення спецкурсів, таких як матеріалознавство, фізика конденсованого стану, кристалографія та інших.

Позитивні результати дисертаційної роботи природньо все таки викликають деякі **зауваження та запитання**:

- в роботі згадується про обробку експериментальних результатів за допомогою ІТ технологій, проте не вказано, якими методами вона проводилася та як це вплинуло на результати дослідження;

- в третьому розділі метою дослідження є виявлення механізмів формування ауксетичних властивостей монокристалів моноклінної сингонії. У анотації до дисертації також згадується про аналіз у цьому розділі закономірностей і механізмів формування характеристичних поверхонь, кутових розподілів та вказівних поверхонь ауксетичності монокристалів кубічної, гексагональної, тетрагональної і ромбічної сингоній, що, на перший погляд, відхиляється від мети розділу.

- в п'ятому розділі запропоновано механізм утворення каналів підвищеної пластичності, вздовж яких відбувається релаксація механічних напружень в шарах індію при криогенних температурах. Чи є можливість на даному етапі досліджень в цьому напрямку оцінити, наскільки наявність в шарах індію структури з такими каналами збільшує їх стійкість в умовах жорсткого низькотемпературного термоциклювання?

- в роботі є одруки та незначні неточності.

Зазначені зауваження не применшують наукові досягнення дисертації Тащука Р. Ю. та не впливають на висновок про належний рівень дослідження і його загальну позитивну оцінку.

**Відсутність порушення академічної доброчесності.** Дисертаційне дослідження є самостійною науковою працею автора. Висновки, рекомендації та пропозиції, що характеризують наукову новизну дисертаційного дослідження, одержані автором особисто. При використанні праць інших учених для аргументації окремих положень дослідження обов'язково вказано посилання на відповідні праці.

#### **Загальний висновок**

Дисертаційна робота Тащука Романа Юрійовича «Деформація анізотропних кристалів з різко нелінійними механічними властивостями в умовах обмеженої релаксації напружень», є актуальною, завершеною і самостійною працею, яка виконана з використанням відповідних методів дослідження, має наукове й практичне значення. Робота 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.), а її автор Ташук Роман Юрійович заслуговує на здобуття ступеня доктора філософії у галузі знань 10 - Природничі науки за спеціальністю 104 - Фізика та астрономія.

**Рецензент**

кандидат фізико-математичних наук, доцент,  
асистент кафедри інформаційних технологій  
та комп'ютерної фізики  
Чернівецького національного університету  
імені Юрія Федьковича

 Іван ГУЦУЛЯК

