

ВІДГУК

офіційного опонента доктора фізико-математичних наук, професора,
професора кафедри інформаційних систем та мереж

Національного університету «Львівська політехніка»

ПЕЛЕЩАКА Романа Михайловича

на дисертаційну роботу ТАЩУКА 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

Більшість матеріалів при розтягуванні в одному напрямку відчують стиснення вздовж інших (ортогональних) напрямків. Коефіцієнт Пуассона пов'язує поперечну деформацію з поздовжньою деформацією в напрямку звуження/розширення. Деякі матеріали мають від'ємний коефіцієнт Пуассона, що дозволяє їм діяти навпаки: розтягнувшись в одному напрямку, вони розтягуються в усіх напрямках. Ці матеріали називають ауксетиками. Така поведінка при деформації зумовлена шарнірно-подібною структурою молекул (для кристалічних ауксетиків) або структурних елементів (у ауксетичних конструкціях). Однак фізична природа явища ауксетичності та механізми виникнення ауксетичних властивостей матеріалів на сьогодні вивчені недостатньо і потребують подальших детальних досліджень.

Для дослідження природи ауксетичності у якості модельних доволі часто використовують кристалічні ауксетики, оскільки теорія деформації кристалічних твердих тіл на сьогодні розроблена значно краще, ніж композитних конструкцій.

Однак ауксетичні властивості досить широкого класу кристалів на сьогодні слабо вивчені. Наприклад, практично відсутня інформація про ауксетичні властивості кристалів низької симетрії, особливо моноклінної і триклінної, 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, але із значно більшою жорсткістю матеріалів. Виявлення і вивчення властивостей таких матеріалів дозволить зробити наступний крок у покращенні ударно-поглинаючих, сейсмічно-стійких конструкцій, засобів захисту. У науковій літературі недостатньо також інформації про роль типу кристалічної структури, хімічного зв'язку і дефектів будови у формуванні ауксетичної поведінки кристалів та їх адаптації до зовнішніх силових дій. Тому вважаю, що завдання, які вирішуються в дисертаційній роботі є без сумніву актуальними з наукової і практичної точок зору.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами

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 таких: «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).

Ступінь обґрунтованості наукових положень, висновків, рекомендацій сформульованих у дисертації, підтверджується застосуванням достовірних методів дослідження, що дозволило Тащуку Р. Ю. зробити істинні теоретичні висновки й надати практичні рекомендації, які характеризуються науковою новизною й теоретичною обґрунтованістю. Дисертант використав методи фізичної акустики для вивчення поширення і згасання УЗ хвиль та комп'ютерної обробки отриманих величин для визначення модулів пружності, податливості та коефіцієнтів Пуассона, проектуючи структуру дисертаційного дослідження.

Дисертаційна робота Ташука Р. Ю. характеризується послідовним і логічним викладом матеріалу. Вона складається із вступу, п'яти розділів, після кожного розділу міститься нумерований список використаної літератури та висновків, загальних висновків та додатку. Робота є самостійною науковою працею.

У вступі обґрунтовано вибір теми дослідження. Розкрито актуальність дослідження, сформульована мета, основні задачі, об'єкти та предмет дослідження, вказана наукова новизна і практична цінність.

У першому розділі висвітлено основні положення теорії пружності для анізотропних кристалів усіх кристалічних симетрій та її трансформація для плівок та наночарів, які зазнають періодичної термомеханічної дії в умовах обмеженої релаксації напружень, зумовленої анізотропією термічних властивостей та термічно- і кристалографічно-обмеженою рухливістю дефектів кристалічної структури. Описані методи вимірювання швидкостей поширення акустичних хвиль та визначення пружних констант кристалів усіх категорій. Автор приділив увагу виявленню особливостей поведінки дефектів кристалічної будови та їх комплексів, утворення і рух яких відіграє вирішальну роль у релаксації механічних напружень у деформованому матеріалі, що виникають в усіх напрямках у кристалах, у тому числі напрямках з «частковими» чи «змішаним» типами ауксетичності. Ґрунтовний огляд літератури по всіх досліджуваних в дисертації об'єктах автор виніс в наступні розділи, що є, як мені видається, вдалим рішенням з огляду на широкий спектр розглянутих матеріалів.

У другому розділі дисертант вивчав вплив деформації та ступеня анізотропії на основні ауксетичні характеристики стабільних і метастабільних поліморфних модифікацій діоксиду кремнію (альфа та бета кварцу, альфа та бета кристобаліту, коеситу і стишовіту, відповідно). Для них побудовані характеристичні поверхні модулів Юнга $E_i(x,y,z)$, кутові розподіли $\mu(\varphi, \theta, \psi)$ та вказівні поверхні ауксетичності. Виявлено однозначну кореляцію між анізотропією характеристичних поверхонь модулів Юнга і ауксетичністю монокристалів. Показано, що і кварц, і кристобаліт стають абсолютними

ауксетиками із ступенем ауксетичності $S_a = 1$ лише при наближенні до точок поліморфних перетворень між α - і β - фазами. При цьому екстремальні значення коефіцієнтів Пуассона μ_{\min} і μ_{\max} також приймають від'ємні значення. Досліджено швидкості поширення акустичних хвиль у кристалах кремнезему у широкому інтервалі температур і показано, що у монокристалах кристобаліту має місце аномальне розм'якшення модулів пружності $C_{11} \rightarrow C_{44}$ та аномальні ефекти рівності повздовжніх v_l і поперечних v_{t1} і v_{t2} фазових швидкостей ультразвуку: $v_l = v_{t1} = v_{t2}$, які пов'язані з появою від'ємних значень коефіцієнтів Пуассона.

В рамках теорії дислокацій проаналізовані особливості поведінки лінійних дефектів та їх об'єднань з точковими дефектами (вакансіями та міжвузловими атомами) в ауксетичних і неауксетичних напрямках у кристалах кремнезему, для яких характерною є «часткова» чи «змішана» ауксетичність.

У третьому розділі із аналізу закономірностей і механізмів формування характеристичних поверхонь $E_i(x, y, z)$, кутових розподілів $\mu(\varphi, \Theta, \psi)$ та вказівних поверхонь ауксетичності монокристалів кубічної, гексагональної, тетрагональної і ромбічної сингоній виявлені кристали, які можуть досягти граничних від'ємних значень коефіцієнтів Пуассона, передбачених класичною теорією пружності для ізотропних середовищ. Показано, що саме масив від'ємних значень коефіцієнтів Пуассона формує зображення вказівних поверхонь ауксетичності. Встановлено, що з пониженням симетрії кристалів зростає кількість кристалографічних напрямків, в яких кристали поступово перетворюються з «часткових» на «змішані» або навіть «абсолютні» ауксетики. Виявлено, що більшість монокристалів вищої і середньої категорії ледве досягають мінімальних граничних значень коефіцієнтів Пуассона. Тому для отримання ауксетичних матеріалів з високими ударно-енергетичними та сейсмічно стійкими характеристиками запропоновано використовувати речовини, що належать до низької кристалографічної симетрії, зокрема моноклінної. Побудовані об'ємні зображення поверхонь модулів Юнга, кутових розподілів коефіцієнтів Пуассона та вказівних поверхонь ауксетичності для ряду

моноклінних кристалів, таких як лабрадорит, дигідрофосфат цезію, ніобат лантану, антрацену, нафталену, бібензилу та ін., які дозволяють визначити розподіл за напрямками екстремальних значень коефіцієнтів Пуассона μ_{min} , μ_{max} і ступінь ауксетичності S_a в цих кристалах. Показано, що екстремальні значення коефіцієнтів Пуассона μ_{min} і μ_{max} для органічних молекулярних кристалів з молекулярно-ковалентним типом зв'язку змінюються у суттєво вужчих інтервалах, ніж для неорганічних моноклінних кристалів з іонним та іонно-ковалентним типами зв'язку. Так інтервал зміни μ_{min} в молекулярних кристалах практично в 3 рази, а μ_{max} майже у 8 разів менший, ніж у неорганічних кристалах, відповідно.

У четвертому розділі дисертації із застосуванням лінійної теорії пружності анізотропних кристалів та використанням експериментальних значень модулів пружності C_{ij} і податливостей S_{ij} , наведених в таблицях Ландольт-Берштейна, вперше побудовані характеристичні поверхні модулів Юнга, кутові розподіли коефіцієнтів Пуассона $\mu(\varphi, \Theta, \psi)$ та вказівні поверхні ауксетичності монокристалів інтерметалічних сполук *Ag-Au*, *Cu-Ni*, *Cu-Au*, *Cu-Zn* і *Cu-Mn*. Встановлено надзвичайно високу чутливість складової екстремальних значень модулів Юнга у напрямку $\langle 110 \rangle$ $E_{\langle 110 \rangle}$ до аномальних деформацій при фазових перетвореннях типу «порядок-непорядок», які протікають як при впорядкуванні атомів, так і при впорядкуванні спінів при магнітних перетвореннях. Виявлено аномалії концентраційних залежностей ауксетичних параметрів $\mu_{min}(X)$, $\mu_{max}(X)$ та ступеня ауксетичності $S_a(X)$ поблизу точок фазового перетворення типу «впорядкування-розпорядкування» першого і другого роду. Досліджені особливості зміни кінематичних властивостей дислокацій і дислокаційних атмосфер із зміною концентрації точкових дефектів у звичайних і ауксетичних напрямках у кристалах *Cu-Mn*. Виявлено існування нано-каналів підвищеної пластичності поблизу екстраплощин крайових дислокацій, що залягають в ауксетичних напрямках у кристалах цих інтерметалідів.

У п'ятому розділі дисертантом досліджено зміну характеру деформації

наношарів індію в залежності від температури і кристалографічних напрямів у шарі при жорсткому низькотемпературному термомеханічному циклуванні в інтервалі 2 – 300 К. Показано, що посилення анізотропії термопружних деформацій у цьому металі при переході від об'ємних ізотропних полікристалічних до квазіанізотропних 2D-наноконтактів призводить до появи в деяких кристалографічних напрямках при напруженнях порядку межі міцності σ_B «від'ємних» дилатацій в інтервалі 15–(80)100 К. Проаналізовано механізми утворення в шарах індію механічних напружень такого рівня, які накопичуються в умовах обмеженого простору і обмеженої рухливості дислокацій при криогенних температурах. В рамках дислокаційної моделі оцінено висоту бар'єрів Пайєрлса для перегинів на дислокаціях в індії та коефіцієнти їх прозорості. Виявлено високу ймовірність їх подолання шляхом проникнення (тунелювання) перегинів-солітонів через бар'єри у тих кристалографічних напрямках, для яких коефіцієнти Пуассона $\mu \sim 0,5$ і які можуть слугувати каналами релаксації руйнівних напружень, що накопичились у шарі.

Наукові положення розроблені особисто дисертантом. Їх **новизна** полягає у тому, що **вперше**:

- Виявлені й описані ауксетичні властивості у високо баричних надтвердих метастабільних монокристалах діоксиду кремнію – коеситу (моноклінна сингонія) та стишовіту (тетрагональна сингонія) розкривають механізми їх пружної та пластичної аномальної деформації.

- Створено пакет комп'ютерних програм для побудови характеристичних поверхонь модулів Юнга, кутових розподілів коефіцієнтів Пуассона, вказівних поверхонь ауксетичності, з яких визначені екстремальні значення μ_{min} і μ_{max} та тип ауксетичності 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 першого (термопружне мартенситне перетворення для *Cu-*

Mn) і другого (феромагнетик–парамагнетик для *Cu-Ni*) роду.

- Виявлено анізотропію екстремальних значень модулів Юнга досліджуваних монокристалів: $E_{\langle 100 \rangle} < E_{\langle 110 \rangle} < E_{\langle 111 \rangle}$. Встановлено надзвичайно високу чутливість складової $E_{\langle 110 \rangle}$ і до фазових перетворень типу «порядок–безпорядок» (типу впорядкування), і до перетворень мартенситного типу. Показано, що досліджувані сплави є в основному неаксіальними ауксетиками.

- Встановлено, що незалежно від типу хімічного зв'язку (ковалентний чи металевий) механічні напруги біля дислокацій в ауксетичних напрямках у часткових (змішаних) ауксетичних кристалах α -кварцу, α -кристобаліту та *Cu-Mn* у рази менші, ніж у неауксетичних. Запропоновано механізм релаксації механічних напружень у часткових (змішаних) ауксетичних кристалах α -кварцу, α -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 і достовірність

Точність визначення швидкостей поширення повздовжніх і поперечних УЗ хвиль, а відповідно і компонент модулів пружності, забезпечується використанням стандартизованих кварцових і ніобат-літієвих кристалів-перетворювачів Х- та Y-зрізів та використанням в якості частоти заповнення резонансної частоти кристалу випромінювача із ніобату літію із стандартною орієнтацією зрізу «X+36°» – для повздовжньої ультразвукової хвилі. Розміри зразків *l* вимірювались на оптиметрі ИЗВ–2 та мікрометрі фірми Mitutoyo. Плоско-паралельність 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 до похибок, які виникають при визначенні швидкостей квазі-повздовжніх і квазі- поперечних акустичних хвиль, додаються похибки при

визначенні кутів некрystalографічних зрізів. Критерієм правильності отриманих результатів є перевірка узгодження отриманих результатів з граничними випадками.

Додатковим підтвердженням обґрунтованості та достовірності наукових результатів є представлення отриманих результатів на всеукраїнських та міжнародних наукових конференціях, що індексуються у наукометричних базах Scopus та Web of Science.

Наукове та практичне значення роботи

Отримані в роботі результати моделювання поверхонь кутового розподілу коефіцієнтів Пуассона, вказівних поверхонь ауксетичності та ступеня ауксетичності для анізотропних кристалів дозволяють прогнозувати поведінку цих матеріалів, при їх використанні на практиці, зокрема, у конструкціях з високими ударно-енергетичними, сейсмічно-стійкими характеристиками, акустичними фільтрами тощо.

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

До змісту дисертаційної роботи слід висловити деякі зауваження:

1. У дисертаційній роботі не зазначено відмінності механізмів виникнення ауксетичності у різних матеріалах, які досліджувалися.
2. У розділі 4 на сторінці 144 автор зазначає, що «Унікальне поєднання магнітних і ауксетичних властивостей, а також ефекту пам'яті форми у сплавах *Cu-Mn* при $X \geq 72 \text{ ат. \% Mn}$ приводить до зростання відношення $\frac{\bar{u}_y \mu > 0}{\bar{u}_y \mu < 0}$ в 5-6 разів, і аномально високих, як для кристалів, значень максимальних і мінімальних коефіцієнтів Пуассона у цьому сплаві ($\mu_{\min} = -7$; $\mu_{\max} = 10$). Все це робить їх перспективними при виготовленні елементів конструкцій, ударно

поглинаючими властивостями, якими можна було б керувати за допомогою магнітних полів». Це припущення частково підтверджується чотирикратною зміною відносної концентрації точкових дефектів поблизу ядра дислокацій у мідно-манганових сплавах. Проте, яким є механізм такого керування?

3. У роботі також зустрічаються деякі стилістичні неточності. Так, наприклад, на сторінці 136 у фразі «У той же час модуль зсуву $G(X)$ практично монотонно зменшується до концентрацій $X = 72\% \text{ Mn}$ а затим різко падає до аномальних значень при температурі початку термопружного мартенситного перетворення (див. табл. 4.3)» коректніше було б написати «... при концентрації Mn , що відповідає початку термопружного мартенситного перетворення (див. табл. 4.3)». Слід зауважити, що на сторінці 134 автор написав, що при такій концентрації Mn термопружне мартенситне перетворення протікає якраз при кімнатних температурах, тобто концентрація мангану і температура перетворення взаємообумовлені, тому це власне прикра неточність. Як і на сторінці 139 в рівняннях (4.11) і (4.12) значок вектору Бюргерса в правій частині рівняння автор замінив на застаріле позначення вектору напівжирним зображенням.

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 достовірних 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 ТАЦУК Роман Юрійович заслуговує на здобуття ступеня доктора філософії у галузі знань 10 Природничі науки за спеціальністю 104 Фізика та астрономія.

Офіційний опонент

доктор фізико-математичних наук,
професор кафедри інформаційних систем та мереж
Національного університету
«Львівська політехніка»



Роман ПЕЛЕЩАК

Підпис засвідчую:

вчений секретар Національного університету
«Львівська політехніка»
кандидат технічних наук, доцент



Роман БРИЛИНСЬКИЙ