**ЗВІТ**

про виконання індивідуального плану освітньо-наукової програми

за третій рік навчання в аспірантурі за спеціальністю 132 «Матеріалознавство»

аспіранта ІМК НАНУ

**ЧЕРНОМОРЕЦЬ Дарії Григорівни**

Тема дисертаційного дослідження: **Процеси формування мікроструктури, фазового складу та оптичних властивостей ІЧ-прозорої кераміки Y2O3**.

План науково-дослідницької діяльності на 3 рік навчання:

1. Стажування в CNR ISSMC, м. Фаенца, Італія.
2. Визначення впливу концентрації іонів цирконію на структурно-фазовий стан, оптичні та фізико-механічні властивості вакуумно-спеченої кераміки Y2O3.
3. Підготовка літературного огляду за темою дисертації.
4. Підготовка та подання у видавництво статті за темою дисертації.
5. Публікація тез за результатами участі у роботі міжнародної наукової конференції.
6. Проходження асистентської педагогічної практики.

За третій рік навчання в аспірантурі за спеціальністю 132 «Матеріалознавство» було виконано всі пункти індивідуального плану наукової роботи, включаючи асистентську педагогічну практику. Опубліковано статтю **D.G. Chernomorets** et al. IR-transparent Y2O3 Ceramics: Effect of Zirconia Concentration on Optical and Mechanical Properties, Open Ceram. 20 (2024) 100666. Взято участь в роботі конференцій: 9th Shaping Conference, м. Варшава (Польща) з усною доповіддю «Optimization of Spark Plasma Sintering for Obtaining Highly Transparent Y2O3 Ceramics with Submicron Grain Size», Young Ceramists Additive Manufacturing Forum (yCAM), м. Тампере (Фінляндія) із усною доповіддю «Towards Transparent Y2O3 Ceramics via Direct Ink Writing».

Досліджено вплив концентрації ZrO2 на структурно-фазовий стан, оптичні та фізико-механічні властивості прозорої кераміки Y2O3, отриманої вакуумним спіканням за відносно низької температури 1735°C. Показано, що тверді розчини заміщення (Y1-хZrx)2O3 утворюються в усьому дослідженому діапазоні концентрацій ZrO2 0-15 мол.%. Встановлено, що оптимальна концентрація ZrO2 в кераміці оксиду ітрію за даних умов спікання складає 15 мол.%. Отримана кераміка характеризується середнім розміром зерен біля 7 мкм, значенням мікротвердості за Вікерсом 10,3 ГПа та оптичним пропусканням 80,4% на довжині хвилі 1319 нм.

Науково-дослідницька діяльність на 4 рік навчання:

1. Визначення структурно-фазового стану прозорої кераміки Y2O3, що містить різну концентрацію спікаючої домішки ZrO2, отриманої методом іскрового плазмового спікання.
2. Підготовка та подання 1 статті за темою дисертації.
3. Підготовка та подання до разової спеціалізованої вченої ради дисертації доктора філософії.
4. Захист дисертації доктора філософії.

**ЗВІТ**

про виконання індивідуального плану освітньо-наукової програми

за перший рік навчання в аспірантурі

аспіранта ІМК НАНУ

**Вовсянікера Марка Юхимовича**

Шифр та назва спеціальності: 132 Матеріалознавство

Тема дисертаційного дослідження: **Визначення з перших принципів властивостей домішкових дефектів в ітрій-алюмінієвому гранаті**

Науковий керівник:

Філь Дмитро Вячеславович, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник.

**I. Виконання індивідуального плану наукової роботи**

Запланована науково-дослідницька діяльність на перший рік навчання:

1. Освоєння сучасної версії програми SIESTA і її можливостей.
2. Проведення DFT розрахунків чистих сполук, що відносяться до фазових діаграм систем Y-Al-O-Ti, Y-Al-O-Fe і Y-Al-O-Cr.
3. Проведення DFT розрахунків власних дефектів в ІAГ.
4. Робота над літературним оглядом за темою дисертації.

Відповідно до індивідуального плану в ході виконання роботи освоєно версію siesta-4.1.5. Для цього встановлено на ПК ОС LinuxMint і програму Siesta відповідної версії. Проведено підготовку і виконано усі необхідні налаштування для здійснення розрахунків на ПК і на кластері НТК "Інститут монокристалів".

Виконано розрахунки DFT для чистого кристалу ІАГу (без дефектів), а також сполук Al2O3 Y2O3, YAl3, простих речовин Al, Y та молекули кисню O2. Зазначені сполуки було обрано відповідно до фазової діаграми ІАГу. Розрахунки виконано для різних варіантів структури для зазначених речовин. Для кожного варіанту проведено розрахунок енергії формування відповідної сполуки даного типу структури. Серед них обрано найбільш енергетично вигідні (тобто з найменшою енергією формування) для використання у подальших розрахунках.

Після виходу нової версії пакету програм siesta — 5.0.1, проведено відповідні розрахунки з використанням нової версії.

З використанням нової версії виконано DFT розрахунки для ІАГу з вакансіями Y, O і Al. Розраховано енергії утворення таких типів дефектів.

Проведено попередні DFT розрахунки енергії дефектів заміщення в ІАГ допованим Ti.

**II. Виконання індивідуального навчального плану**

Згідно з індивідуальним навчальним планом вивчено такі дисципліни, підсумкова оцінка за кожну з яких склала:

1. Іноземна мова професійного спрямування для підготовки аспірантів до рівня загальноєвропейського стандарту володіння мовою С1 — 96 балів;
2. Філософія науки і культури — 99 балів;
3. Менеджмент наукових проектів, підготовка наукових публікацій та презентацій — залік.