ВИТЯГ
з протоколу № 4 засідання Вченої ради
Інституту монокристалів НАН України
від 12 березня 2026 року
(гібридний формат)

Кількість членів Вченої ради – 19 осіб.
Присутні – 16 осіб.
З них – 11 off-line
5 –on-line

СЛУХАЛИ: звіт аспіранта **Вовсянікера Марка Юхимовича** про виконання індивідуального плану науково-дослідницької роботи за перше півріччя третього року навчання в аспірантурі Інституту монокристалів НАН України «Знаходження енергій формування домішкових дефектів за участі атомів Cr, Fe. Знаходження енергій формування комплексів домішкових дефектів і комплексів домішкових і власних дефектів в кристалах YAG, допованих атомами Cr, Fe. Аналіз на основі DFT розрахунків впливу умов вирощування і відпалу на концентрації власних і домішкових дефектів та комплексних дефектів в кристалах YAG, допованих Cr та Fe.» Термін виконання 01.11.2025-31.03.2026.

Відповідно до індивідуального плану в ході виконання роботи виконано розрахунки DFT для ІАГу з дефектами заміщення $Fe_{Al(o)}$, $Fe_{Al(t)}$, Fe_Y та $Cr_{Al(o)}$, $Cr_{Al(t)}$ та Cr_Y, міжвузловими дефектами Fe_i, Cr_i і для комплексів даних дефектів із власними дефектами ІАГу (для кожного типу дефектів розглянуто декілька варіантів зарядового стану). Розраховано енергії утворення таких типів дефектів.

Проведено DFT розрахунки для ґратки ІАГу без дефектів з використанням функціоналу PBE0 для уточнення значення ширини забороненої зони. Виконано розрахунки для комірок, що складаються з 2 і 3 елементарних комірок ІАГу і містять один дефект певного типу, для уточнення поправки Маделунга, що компенсує внесок електростатичної взаємодії між періодичними зображеннями дефектів. Для оцінки концентрацій дефектів у ІАГ за кімнатної температури враховано механізм перерозподілу дефектів між їх зарядовими станами при охолодженні зі збереженням сумарної концентрації дефекту кожного типу.

За одержаними результатами подано до публікації у журналі Functional Materials статтю “Cooling-Induced Charge-State Redistribution of Native Defects in Yttrium Aluminum Garnet”, а також тези на 6-ту міжнародну конференцію з фізики конденсованого стану речовини і фізики низьких температур (VI International Conference Condensed Matter & Low Temperature Physics 2026

Виконання індивідуального навчального плану

Згідно з індивідуальним навчальним планом під час проходження асистентської педагогічної практики розроблено матеріал лекцій на теми "Методи випробування механічних властивостей", "Вимірювання тріщиностійкості матеріалів" в рамках дисципліни "Сучасні методи дослідження властивостей матеріалів" для аспірантів 2 року навчання і проведено лекційні заняття за відповідними темами.

УХВАЛИЛИ: за результатами гібридного голосування (методом он-лайн, з використання поштової розсилки): «за» – 16, «проти» – 0, «утримався» – 0)

Затвердити звіт аспіранта **Вовсянікера Марка Юхимовича** про виконання індивідуального плану науково-дослідницької роботи та індивідуального навчального плану за за перше півріччя третього року навчання в аспірантурі Інституту монокристалів НАН України «Знаходження енергій формування домішкових дефектів за участі атомів Cr, Fe. Знаходження енергій формування комплексів домішкових дефектів і комплексів домішкових і власних дефектів в кристалах YAG, допованих атомами Cr, Fe. Аналіз на основі DFT розрахунків впливу умов вирощування і відпалу на концентрації власних і домішкових дефектів та комплексних дефектів в кристалах YAG, допованих Cr та Fe.». Термін виконання 01.11.2025-31.03.2026.

Постановили: роботу за індивідуальним планом за відповідний термін вважати виконаною.

Рішення: прийнято одноголосно

Голова Вченої ради,
академік НАН України Ігор ПРИТУЛА

Вчений секретар, к.ф.-м.н. Костянтин КУЛИК

ВИТЯГ

з протоколу № 4 засідання Вченої ради
Інституту монокристалів НАН України
від 12 березня 2026 року
(гібридний формат)

Кількість членів Вченої ради – 19 осіб.
Присутні – 16 осіб.
З них – 11 off-line
5 –on-line

СЛУХАЛИ: звіт аспіранта **Смирнова Вадима Максимовича** про виконання індивідуального плану науково-дослідницької роботи за третє півріччя навчання в аспірантурі Інституту монокристалів НАН України «Розширення програмного забезпечення для дослідження поведінки активних частинок в гетерогенних системах. Дослідження процесів кластеризації у двокомпонентних системах активних частинок в залежності від їх щільності та швидкості» Термін виконання 01.10.2025-31.03.2026.

Метою даного дослідження є виявлення механізмів кластеризації активних частинок та їх динаміки з використанням комп'ютерного моделювання. Для цього, відповідно до індивідуального плану, розроблено програмне забезпечення, за допомогою якого моделюється рух активних частинок згідно модифікованої моделі Вічека, яка грунтується на взаємодії, при якій кожна активна частинка вирівнює свій вектор швидкості з середнім напрямком руху сусідніх частинок, які знаходяться в рамках визначеного радіуса взаємодії. Флуктуації середовища враховуються у вигляді шуму, який додається до розрахованого напрямку руху кожної активної частинки.

При проведенні близько 30 тис. чисельних експериментів за різних умов були отримані та уточнені статистичні дані про глобальний параметр порядку, а також кількість, розмір, мінімальний та максимальний об'єм утворених кластерів на кожному часовому кроці симуляції при різних значеннях амплітуди шуму та щільності активних частинок. Статистичний аналіз даних дозволив визначити ключові властивості кластеризації.

Розроблено теоретичну ентропійну модель флуктуаційного утворення кластерів активних частинок в періодичному просторі, яка наразі уточнюється. На даний момент написано текст статті з описом всіх отриманих експериментальних результатів та готується для публікації в журналі Physical Review E.

Додатково було розширено програмне забезпечення для дослідження поведінки активних частинок в гетерогенних системах. Проводяться підготовчі роботи для проведення експериментів в розширеній, двокомпонентній моделі Вічека.

Результати роботи були представлені на міжнародній конференції молодих вчених "Functional materials for technical and biomedical applications", 14-16 жовтня 2025 р., Львів, Україна, ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ, Vadym Smyrnov, Volodymyr Yanovsky, Clustering effects of active particle ensembles, p.7, 2025.

Виконання індивідуального навчального плану

Згідно з індивідуальним навчальним планом вивчено такі дисципліни:

1. Сучасні методи досліджень властивостей матеріалів. Форма контролю – екзамен. Отримано 100 балів.
2. Наноматеріали та нанотехнології. Форма контролю – залік. Отримано 100 балів.

Освітня програма виконана повністю.

УХВАЛИЛИ: за результатами гібридного голосування (методом он-лайн, з використання поштової розсилки): «за» – 16, «проти» – 0, «утримався» – 0)

Затвердити звіт аспіранта **Смирнова Вадима Максимовича** про виконання індивідуального плану науково-дослідницької роботи та індивідуального навчального плану за третє півріччя навчання в аспірантурі Інституту монокристалів НАН України «Розширення програмного забезпечення для дослідження поведінки активних частинок в гетерогенних системах. Дослідження процесів кластеризації у двокомпонентних системах активних частинок в залежності від їх щільності та швидкості». Термін виконання 01.10.2025-31.03.2026.

Постановили: роботу за індивідуальним планом за відповідний термін вважати виконаною.

Рішення: прийнято одноголосно

Голова Вченої ради,
академік НАН України Ігор ПРИТУЛА

Вчений секретар, к.ф.-м.н. Костянтин КУЛИК

ВИТЯГ

з протоколу № 4 засідання Вченої ради
Інституту монокристалів НАН України
від 12 березня 2026 року
(гібридний формат)

Кількість членів Вченої ради – 19 осіб.
Присутні – 16 осіб.
З них – 11 off-line
5 –on-line

СЛУХАЛИ: звіт аспіранта **Пугачова Дениса Олеговича** виконання індивідуального плану науково-дослідницької роботи за третє півріччя навчання в аспірантурі Інституту монокристалів НАН України «Проведення DFT розрахунків енергій утворення точкових дефектів в Y_2O_3, допованому чотиривалентними (Ti, Mn) і двовалентними (Ca, Mg) іонами. Вивчення впливу допування на параметри решітки і зонну структуру» Термін виконання 01.10.2025-31.03.2026.

При виконанні роботи за індивідуальним планом освоєно версію прогрвми siesta-5.2.1.

Після участі у конференції HighMatTech-2025 спираючись на доповіді, які там прозвучали, було ухвалено рішення доповнити роботу дослідженнями домішок фтору.

Виконано розрахунки DFT для чистого кристалу Y_2O_3 (без дефектів), а також сполук YFO, простих речовин O, Y, F та молекули кисню O_2.

Проведено DFT розрахунки енергії дефектів в кристалі Y_2O_3, а саме:

- Дефекти заміщення: F_O у зарядових станах q = -1, +1 (в одиницях |e|);
- Кисневі вакансії: V_O у зарядових станах q = 0, +1, +2;
- Ітрієві вакансії: $V_{Y(a)}$ та $V_{Y(d)}$ у зарядових станах q = −3;
- Міжвузлові атоми кисню: O_i у позиціях Вайкоффа 16(c), у зарядових станах q = 0, −1, −2;
- Комплексні дефекти: F_O–V_Y, F_O–V_Y–F_O, та F_O–V_Y–F_O–F_O, V_O–V_Y, F_O–O_i

Побудовані фазові діаграми та розраховані енергії утворення дефектів.

Проводилися розрахунки суперкомірок для обчислення поправки Маделунга у комплексних дефектах з Цирконієм.

Публікації за звітний період

1. Стаття Puhachev, D., & Fil, D. (2026). *DFT Study of Point Defects in Y_2O_3 Doped with Zirconium*. Materials Science Forum, 1178, 79–84. https://doi.org/10.4028/p-V37AXc
2. Тези: Пугачов Д. О., Філь Д. В. DFT Study of Point Defects in Y_2O_3 Doped with Zirconium // *HighMatTech-2025: Book of Abstracts of the International Conference on High-Tech Materials and Technologies*. – 2025. – С. 103.

Виконання індивідуального навчального плану

Згідно з індивідуальним навчальним планом вивчено дисципліну:

Сучасні методи досліджень властивостей матеріалів. Підсумкова оцінка: - 98 балів.

УХВАЛИЛИ: за результатами гібридного голосування (методом он-лайн, з використання поштової розсилки): «за» – 16, «проти» – 0, «утримався» – 0)

Затвердити звіт аспіранта **Пугачова Дениса Олеговича** про виконання індивідуального плану науково-дослідницької роботи та індивідуального навчального плану за третє півріччя навчання в аспірантурі Інституту монокристалів НАН України «Проведення DFT розрахунків енергій утворення точкових дефектів в Y_2O_3, допованому чотиривалентними (Ti, Mn) і двовалентними (Ca, Mg) іонами. Вивчення впливу допування на параметри решітки і зонну структуру». Термін виконання 01.10.2025-31.03.2026.

Постановили: роботу за індивідуальним планом за відповідний термін вважати виконаною.

Рішення: прийнято одноголосно

Голова Вченої ради,
академік НАН України — Ігор ПРИТУЛА

Вчений секретар, к.ф.-м.н. — Костянтин КУЛИК