ВИТЯГ
з протоколу № 5 он-лайн засідання Вченої ради
Інституту монокристалів НАН України
від 27 березня 2025 року

Кількість членів Вченої ради – 19 осіб.
Присутні – 15 осіб.

СЛУХАЛИ: звіт аспіранта **Пугачова Дениса Олеговича** про виконання індивідуального плану науково-дослідницької роботи за перше півріччя навчання в аспірантурі Інституту монокристалів НАН України «Освоєння сучасної версії програми SIESTA і її можливостей. Проведення DFT розрахунків енергій утворення власних точкових дефектів в Y_2O_3 та впливу добавки ZrO_2»Термін виконання 01.10.2024-31.03.2025.

Відповідно до індивідуального плану в ході виконання роботи освоєно версію siesta-5.2.1. Для цього встановлено на ПК ОС Linux Ubuntu і програму SIESTA відповідної версії.

Виконано аналіз літературних джерел, у яких викладено результати експериментальних досліджень Y_2O_3, допованого Zr та теоретичні роботи, де властивості кристала Y_2O_3 вивчалися за допомогою DFT методу.

Виконано розрахунки DFT для чистого кристалу Y_2O_3 (без дефектів), а також сполук ZrO_2, простих речовин O, Y, Zr та молекули кисню O_2.

Проведено попередні DFT розрахунки енергії дефектів заміщення в Y_2O_3 допованим Zr в позиції a з зарядом дефекту 0 та +1. Були побудовані фазові діаграми та розраховані енергії утворення дефектів.

УХВАЛИЛИ: за результатами дистанційного голосування (методом он-лайн, з використання поштової розсилки: «за» – 15, «проти» – 0, «утримався» – 0)

Затвердити звіт аспіранта **Пугачова Дениса Олеговича** про виконання індивідуального плану науково-дослідницької роботи за перше півріччя навчання в аспірантурі Інституту монокристалів НАН України «Освоєння сучасної версії програми SIESTA і її можливостей. Проведення DFT розрахунків енергій утворення власних точкових дефектів в Y_2O_3 та впливу добавки ZrO_2 ». Термін виконання 01.10.2024-31.03.2025.

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 № 5 он-лайн засідання Вченої ради
Інституту монокристалів НАН України
від 27 березня 2025 року

Кількість членів Вченої ради – 19 осіб.
Присутні – 15 осіб.

Побудова програмного забезпечення для дослідження поведінки активних частинок

СЛУХАЛИ: звіт аспіранта **Смирнова Вадима Максимовича** про виконання індивідуального плану науково-дослідницької роботи за перше півріччя навчання в аспірантурі Інституту монокристалів НАН України «Побудова програмного забезпечення для дослідження поведінки активних частинок. Дослідження фазових перетворень у ансамблі активних частинок та виникнення кластерів.» Термін виконання 01.10.2024-31.03.2025.

Відповідно до індивідуального плану в ході виконання роботи розроблено програмне забезпечення на мові програмування JavaScript для дослідження поведінки активних частинок на основі моделі Вічека.

Програмне забезпечення дозволяє збирати числові дані в процесі проведення експериментів, такі як глобальний параметр порядку, кількість та розмір кластерів. Всі дані зберігаються в локальній базі даних PostgreSQL.

Проаналізувавши результати експериментів були отримані розподіли ймовірностей створення кластерів певних розмірів в певні кроки симуляції, досліджено їх еволюцію з часом, виявлено наявність критичного розміру кластерів, виявлено фазовий перехід другого роду від фази хаотичного руху частинок до колективної саморухомої фази, визначено залежності середнього розміру та середньої кількості кластерів від часу, отримано закон збереження, який визначає співвідношення між середнім розміром та середньою кількістю кластерів.

УХВАЛИЛИ: за результатами дистанційного голосування (методом он-лайн, з використання поштової розсилки: «за» – 15, «проти» – 0, «утримався» – 0)

Затвердити звіт аспіранта **Смирнова Вадима Максимовича** про виконання індивідуального плану науково-дослідницької роботи за перше півріччя навчання в аспірантурі Інституту монокристалів НАН України «Побудова програмного забезпечення для дослідження поведінки активних частинок. Дослідження фазових перетворень у ансамблі активних частинок та виникнення кластерів». Термін виконання 01.10.2024-31.03.2025.

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 № 5 он-лайн засідання Вченої ради
Інституту монокристалів НАН України
від 27 березня 2025 року

Кількість членів Вченої ради – 19 осіб.
Присутні – 15 осіб.

СЛУХАЛИ: звіт аспіранта **Вовсянікера Марка Юхимовича** про виконання індивідуального плану науково-дослідницької роботи за перше півріччя другого року навчання в аспірантурі Інституту монокристалів НАН України «Знаходження енергій утворення домішкових дефектів. Розрахунок рівнів енергії в забороненій зоні Ti:YAG, пов'язаних з такими дефектами»Термін виконання 01.11.2024-31.03.2025

Відповідно до індивідуального плану в ході виконання роботи виконано розрахунки DFT для сполук Ti_2O, TiO, Ti_2O_3, Ti_3O_5, TiO_2. Зазначені сполуки було обрано відповідно до фазової діаграми ІАГу і Ti. Розрахунки виконано для різних варіантів структури для зазначених речовин. Для кожного варіанту проведено розрахунок енергії утворення відповідної сполуки даного типу структури. Серед них обрано найбільш енергетично вигідні (тобто з найменшою енергією уторення) для використання у подальших розрахунках.

Виконано DFT розрахунки для ІАГу з антисайт дефектами $Al^{\times}_{Y}$, $Y^{\times}_{Al(o)}$, $Y^{\times}_{Al(t)}$ і для комплексів даних дефектів. Розраховано енергії утворення таких типів дефектів.

Проведено DFT розрахунки енергії дефектів заміщення в ІАГ допованому Ti, а також комплексів дефектів заміщення і комплексів дефектів заміщення і власних дефектів ІАГу, а саме вакансій і антисайт дефектів.

За одержаними результатами подано тези на 5-ту міжнародну конференцію з фізики конденсованого стану речовини і фізики низьких температур (V International Conference Condensed Matter & Low Temperature Physics 2025).

УХВАЛИЛИ: за результатами дистанційного голосування (методом он-лайн, з використання поштової розсилки: «за» – 15, «проти» – 0, «утримався» – 0)

Затвердити звіт аспіранта **Вовсянікера Марка Юхимовича** про виконання індивідуального плану науково-дослідницької роботи за перше півріччя другого року навчання в аспірантурі Інституту монокристалів НАН України «Знаходження енергій утворення домішкових дефектів. Розрахунок рівнів енергії в забороненій зоні Ti:YAG, пов'язаних з такими дефектами»Термін виконання 01.11.2024-31.03.2025

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