

АНОТАЦІЯ

Короп М. М. Використання методів штучного інтелекту та машинного навчання для автоматизації досліджень екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 105 – Прикладна фізика та наноматеріали. – Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича МОН України, Чернівці, 2026.

Дисертаційна робота присвячена розробці мультимодальної системи на основі методів штучного інтелекту та машинного навчання для автоматизації досліджень екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те. Єдиний інструментальний комплекс поєднує автоматизований збір даних з наукової літератури, аналіз мікроструктурних зображень та прогнозування термоелектричних властивостей для оптимізації хімічного складу і технологічних режимів синтезу матеріалу.

Дисертація складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел та трьох додатків.

У **вступі** обґрунтовано актуальність роботи; сформульовано мету, основні завдання, об'єкт та предмет дослідження; вказано наукову новизну і практичну цінність отриманих результатів; наведено інформацію про особистий внесок здобувача, апробацію роботи, її структуру та обсяг.

У **першому розділі** дисертації проведено аналіз стану досліджень у галузі термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те, синтезованих методом гарячої екструзії. Представлено літературний огляд, що розкриває ключові напрямки застосування методів штучного інтелекту та машинного навчання у термоелектричному матеріалознавстві, зокрема кероване та некероване машинне навчання, нейронні мережі, прогнозування властивостей термоелектричних матеріалів, а також аналіз мікроструктури методами комп'ютерного зору.

Проаналізовано перспективи різних методів машинного навчання, генеративних моделей та зворотнього проєктування матеріалів.

На основі аналізу встановлено, що для матеріалів на основі Ві–Те, отриманих методом гарячої екструзії, залишається невирішеною задача комплексного врахування мікроструктури, хімічного складу та технологічних параметрів у межах єдиної прогностичної моделі, а фрагментарність та неструктурованість наявних даних є основними обмеженнями для широкого впровадження методів машинного навчання у термоелектричному матеріалознавстві.

У **другому розділі** дисертації побудовано фізичну та комп'ютерну модель гарячої екструзії термоелектричного матеріалу на основі Ві–Те у середовищі COMSOL Multiphysics 6.2. На основі параметричного розрахунку встановлено домінуючий вплив швидкості деформації на силу екструзії: при зростанні швидкості в 3,1 раза сила екструзії збільшується з 22,8 до 78,2 кН, тоді як зниження температури з 500 до 340 °С зумовлює зростання лише на 40–50 %. Обґрунтовано критерій якості поверхні екструдату: $v \leq 0,48$ мм/хв при $T \geq 400$ °С. За результатами моделювання визначено структуру цільових ознак для формування системи збору даних.

Розроблено спеціалізовану систему автоматизованого збору термоелектричних параметрів із наукових джерел на основі додатково навченої мовної моделі MatSciBERT із двома класифікаційними головами для задач розпізнавання іменованих сутностей (NER) та встановлення зв'язків між ними (RE). Описано модуль попередньої обробки документів, що включає обробку PDF-документів та оптичне розпізнавання інформації зі сканованих зображень.

Встановлено, що предметна адаптація є визначальним фактором для точності екстракції: MatSciBERT перевершує базову модель BERT-base на 9 в.п. за метрикою F1-score (NER). Збільшення обсягу навчальних даних у 5 разів (з 1200 до 6000 фрагментів) забезпечило приріст F1 (NER) на 10 в.п. (до 0,82) та F1 (RE) на

8 в.п. (до 0,84), що дозволило сформувати структуровану базу даних властивостей екструдованих матеріалів на основі Ві–Те для подальшого аналізу та оптимізації.

У **третьому розділі** запропоновано методику та реалізовано мультимодальну систему комп'ютерного зору для кількісного аналізу мікроструктури екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те. Система поєднує два масштаби дослідження: атомно-силову мікроскопію для наномасштабної топографії та оптичну металографію темного поля для аналізу структури зерен. Описано методику підготовки зразків, проведення АСМ-вимірювань та алгоритми обробки топографічних даних. Розроблено модель семантичної сегментації на основі модифікованої архітектури U-Net, яка досягає середнього показника $mIoU = 0,73$ ($F1 = 0,91$ для класу `grain_matrix`, $F1 = 0,85$ для класу `grain_boundary`), що перевершує базову модель на 6 в.п. та дозволяє автоматизувати розпізнавання шести класів структурних компонентів.

Побудовано мультимодальну модель прогнозування ключових термоелектричних параметрів (коефіцієнт Зеєбека S , електропровідність σ , теплопровідність κ , фактор потужності PF , добротність ZT), що інтегрує мікроструктурні зображення, структуровані числові дані про хімічний склад і параметри екструзії та контрастивне навчання через механізм крос-модальної уваги. Модель досягає $MAPE = 5,3 \%$ для показника ZT , що суттєво перевершує результати одномодальних підходів ($9,1 \%$ та $7,4 \%$) і підтверджує синергетичний ефект обраної архітектури.

Аналіз інтерпретованості за допомогою методу Grad-CAM засвідчив відповідність модельних залежностей фізичним механізмам: при прогнозуванні теплопровідності модель фокусується на структурних дефектах, тоді як для коефіцієнта Зеєбека визначальним є внесок структурованих даних про хімічний склад та електронну структуру.

У **четвертому розділі** розглянуто застосування розробленої системи для

оптимізації термоелектричних матеріалів. Реалізовано алгоритм зворотного проектування для екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те, який за заданими цільовими значеннями термоелектричних властивостей прогнозує оптимальний хімічний склад та параметри синтезу із оцінкою невизначеності прогнозу через ансамбль моделей, що дозволяє скоротити цикл розробки нових матеріалів шляхом заміни систематичного перебору складів цілеспрямованим пошуком.

Розроблено алгоритм багатокритеріальної оптимізації для трьох типів термоелектричних пристроїв: генераторів із максимізацією ZT, модулів Пельтьє та сенсорів. Описано систему інтелектуального управління технологічним процесом екструзії.

Створено цілісне програмне забезпечення, яке поєднує в межах єдиного інструментального середовища автоматизований збір даних із літератури, комп'ютерне моделювання процесів екструзії, мультимодальний аналіз мікроструктури, прогнозування термоелектричних властивостей та зворотне проектування матеріалів. Ця розробка забезпечує автоматизацію повного циклу дослідження екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те – від інтелектуального аналізу літературних джерел до оптимізації хімічного складу та технологічних режимів. Програмний комплекс не має аналогів за функціональними можливостями як у вітчизняній, так і в закордонній практиці.

Наукова новизна одержаних результатів:

1. Вперше розроблено спеціалізовану систему автоматизованого збору термоелектричних параметрів матеріалів із наукових публікацій, ядром якої є додатково навчена мовна модель MatSciBERT із двома класифікаційними головами для задач NER та RE, що дозволило сформувати структуровану базу даних властивостей екструдованих матеріалів на основі Ві–Те для подальшого прогнозування та оптимізації їх термоелектричних характеристик методами

машинного навчання. На незалежній тестовій вибірці модель досягає $F1 = 0,82$ для NER та $F1 = 0,84$ для RE.

2. Вперше запропоновано методику та реалізовано мультимодальну систему комп'ютерного зору для кількісного аналізу мікроструктури екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те, що поєднує два масштаби дослідження: атомно-силову мікроскопію для наномасштабної топографії та оптичну металографію темного поля для аналізу структури зерен, що дозволило автоматизувати сегментацію шести класів структурних компонентів та встановити кількісні кореляції між мікроструктурними характеристиками поверхні та термоелектричними властивостями матеріалу.
3. Вперше побудовано мультимодальну модель прогнозування термоелектричних параметрів (коефіцієнт Зеєбека S , електропровідність σ , теплопровідність κ , фактор потужності PF , добротність ZT), яка інтегрує три паралельні входні гілки: мікроструктурні зображення, структуровані числові дані про хімічний склад та параметри екструзії та контрастивне навчання для узгодження латентних представлень, що дозволило розв'язати обернену багатофакторну задачу оптимізації термоелектричного матеріалу за заданих граничних умов.
4. Вперше реалізовано алгоритм зворотного проєктування для екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те, який за заданими цільовими значеннями термоелектричних властивостей прогнозує оптимальний хімічний склад та параметри синтезу, що дозволяє скоротити цикл розробки нових термоелектричних матеріалів із заданими функціональними характеристиками.

Практичне значення одержаних результатів.

Розроблено інтелектуальну комп'ютерну програму для комплексного розв'язання оберненої багатофакторної задачі із оптимізації термоелектричних

матеріалів на основі Bi–Te при заданих граничних умовах, що не має аналогів як на вітчизняному, так і на міжнародному рівні. Програма забезпечує автоматизований збір даних із наукової літератури, автоматичну сегментацію мікроструктури, прогнозування термоелектричних властивостей, зворотне проєктування оптимального хімічного складу та параметрів синтезу за заданими цільовими властивостями з оцінкою невизначеності прогнозу. Результати роботи застосовуються при виконанні науково-дослідної роботи в Інституті термоелектрики НАН України та МОН України за відомчим замовленням Відділення матеріалознавства НАН України «Використання методів штучного інтелекту та машинного навчання для підвищення ефективності термоелектричних матеріалів на основі телуриду вісмуту» (номер державної реєстрації 0125U000210).

Ключові слова: термоелектричні матеріали, термоелектричні властивості, перетворювачі енергії, зона провідності, фонон, мікроструктурні характеристики, тверді розчини, моделі, комп'ютерне моделювання, комп'ютерні методи, інтелектуальна система, штучний інтелект, машинне навчання, алгоритми, мікроструктурний аналіз.

ABSTRACT

Korop M. Application of artificial intelligence and machine learning methods for research automation on extruded Bi–Te-based thermoelectric materials. – qualifying scientific work as a manuscript.

Thesis on search for the Doctor of Philosophy degree in specialty 105 – Applied Physics and Nanomaterials. – Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University, Ministry of Education and Science of Ukraine, Chernivtsi, 2026.

The thesis is devoted to the development of a multimodal system based on artificial intelligence and machine learning methods for the automation of research on extruded Bi–Te-based thermoelectric materials. The unified instrumental platform integrates automated data extraction from scientific literature, microstructural image analysis, and

thermoelectric property prediction for the optimization of chemical composition and technological synthesis parameters.

The thesis consists of an introduction, four chapters, conclusions, a list of references, and three appendices.

The introduction substantiates the relevance of the research; formulates the aim, principal objectives, object, and subject of the study; specifies the scientific novelty and practical value of the obtained results; and provides information on the personal contribution of the author, approbation, structure, and scope of the work.

The first chapter presents an analysis of the current state of research in the field of Bi–Te-based thermoelectric materials synthesized by hot extrusion. A literature review is provided that covers the key directions of artificial intelligence and machine learning application in thermoelectric materials science, including supervised and unsupervised machine learning, neural networks, prediction of thermoelectric material properties, and microstructure analysis by computer vision methods. The prospects of various machine learning approaches, generative models, and inverse material design are analyzed.

Based on the analysis, it has been established that for Bi–Te-based materials obtained by hot extrusion, the problem of comprehensive integration of microstructure, chemical composition, and technological parameters within a single predictive model remains unresolved, while the fragmentary and unstructured nature of the available data constitutes the principal limitation for the widespread adoption of machine learning methods in thermoelectric materials science.

In the second chapter, a physical and computational model of the hot extrusion of Bi–Te-based thermoelectric material has been developed in the COMSOL Multiphysics 6.2 environment. Parametric calculations have established the dominant influence of deformation rate on the extrusion force: a 3.1-fold increase in velocity results in the extrusion force rising from 22.8 to 78.2 kN, whereas a temperature decrease from 500 to 340 °C causes an increase of only 40–50%. A surface quality criterion for the extrudate

has been substantiated: $v \leq 0.48$ mm/min at $T \geq 400$ °C. Based on the simulation results, the structure of target features for the data acquisition system has been determined.

A specialized system for automated extraction of thermoelectric parameters from scientific sources has been developed, based on a fine-tuned MatSciBERT language model equipped with two classification heads for named entity recognition (NER) and relation extraction (RE) tasks. A document preprocessing module has been described, which includes PDF document processing and optical character recognition from scanned images.

It has been established that domain-specific adaptation is the determining factor for extraction accuracy: MatSciBERT surpasses the baseline BERT-base model by 9 percentage points in F1-score (NER). A five-fold increase in training data volume (from 1,200 to 6,000 fragments) yielded an improvement in F1 (NER) of 10 p.p. (to 0.82) and in F1 (RE) of 8 p.p. (to 0.84), which enabled the formation of a structured database of properties of extruded Bi–Te-based materials for subsequent analysis and optimization.

In **the third chapter**, a methodology has been proposed and a multimodal computer vision system has been implemented for quantitative analysis of the microstructure of extruded Bi–Te-based thermoelectric materials. The system integrates two scales of investigation: atomic force microscopy for nanoscale topography and dark-field optical metallography for grain structure analysis. The sample preparation methodology, AFM measurement procedures, and topographic data processing algorithms are described. A semantic segmentation model based on a modified U-Net architecture has been developed, achieving a mean mIoU = 0.73 (F1 = 0.91 for the grain_matrix class, F1 = 0.85 for the grain_boundary class), which surpasses the baseline model by 6 p.p. and enables automated recognition of six classes of structural components.

A multimodal model for the prediction of key thermoelectric parameters (Seebeck coefficient S , electrical conductivity σ , thermal conductivity κ , power factor PF, figure of merit ZT) has been constructed, integrating microstructural images, structured numerical

data on chemical composition and extrusion parameters, and contrastive learning through a cross-modal attention mechanism. The model achieves a MAPE of 5.3% for the ZT figure of merit, which significantly outperforms unimodal approaches (9.1% and 7.4%) and confirms the synergistic effect of the chosen architecture.

Interpretability analysis using the Grad-CAM method has demonstrated the correspondence between the model dependencies and physical mechanisms: when predicting thermal conductivity, the model focuses on structural defects, whereas for the Seebeck coefficient, the contribution of structured data on chemical composition and electronic structure is determinative.

In **the fourth chapter**, the application of the developed system for the optimization of thermoelectric materials is considered. An inverse design algorithm for extruded Bi–Te-based thermoelectric materials has been implemented, which predicts the optimal chemical composition and synthesis parameters for given target values of thermoelectric properties with prediction uncertainty estimation via a model ensemble, thereby enabling the reduction of the new material development cycle by replacing systematic compositional screening with targeted search.

A multi-objective optimization algorithm for three types of thermoelectric devices has been developed: generators with ZT maximization, Peltier modules, and sensors. An intelligent control system for the extrusion technological process has been described.

An integrated software package has been created that combines, within a unified instrumental environment, automated data extraction from literature, computational modeling of extrusion processes, multimodal microstructure analysis, thermoelectric property prediction, and inverse material design. This development provides automation of the complete research cycle for extruded Bi–Te-based thermoelectric materials – from intelligent analysis of literature sources to optimization of chemical composition and technological regimes. The software package has no analogues in terms of functional capabilities in either domestic or international practice.

Scientific novelty of the results obtained.

1. For the first time, a specialized system for automated extraction of thermoelectric parameters from scientific publications has been developed, the core of which is a fine-tuned MatSciBERT language model with two classification heads for NER and RE tasks, which enabled the formation of a structured database of properties of extruded Bi–Te-based materials for subsequent prediction and optimization of their thermoelectric characteristics by machine learning methods. On an independent test set, the model achieves $F1 = 0.82$ for NER and $F1 = 0.84$ for RE.
2. For the first time, a methodology has been proposed and a multimodal computer vision system has been implemented for quantitative microstructure analysis of extruded Bi–Te-based thermoelectric materials, integrating two investigation scales: atomic force microscopy for nanoscale topography and dark-field optical metallography for grain structure analysis, which enabled automated segmentation of six classes of structural components and the establishment of quantitative correlations between surface microstructural characteristics and thermoelectric properties of the material.
3. For the first time, a multimodal model for the prediction of thermoelectric parameters (Seebeck coefficient S , electrical conductivity σ , thermal conductivity κ , power factor PF, figure of merit ZT) has been constructed, integrating three parallel input branches: microstructural images, structured numerical data on chemical composition and extrusion parameters, and contrastive learning for latent representation alignment, which enabled the solution of the inverse multifactorial optimization problem for thermoelectric materials under given boundary conditions.
4. For the first time, an inverse design algorithm for extruded Bi–Te-based thermoelectric materials has been implemented, which predicts the optimal chemical composition and synthesis parameters for given target values of thermoelectric properties, thereby enabling the reduction of the development cycle for new

thermoelectric materials with specified functional characteristics.

Practical significance of the results obtained.

An intelligent computer program has been developed for the comprehensive solution of the inverse multifactorial optimization problem for Bi–Te-based thermoelectric materials under given boundary conditions, which has no analogues at either the national or the international level. The program provides automated data extraction from scientific literature, automatic microstructure segmentation, thermoelectric property prediction, and inverse design of optimal chemical composition and synthesis parameters for given target properties with prediction uncertainty estimation. The results of the work are applied in the execution of research at the Institute of Thermoelectricity of the National Academy of Sciences of Ukraine and the Ministry of Education and Science of Ukraine under a departmental order of the Division of Materials Science of the NAS of Ukraine “Application of Artificial Intelligence and Machine Learning Methods for Enhancing the Efficiency of Bismuth Telluride-Based Thermoelectric Materials” (state registration number 0125U000210).

Keywords: thermoelectric materials, thermoelectric properties, energy converters, band structure, phonon, microstructure characteristics, solid solutions, models, computer modelling, computing methods, intelligent system, artificial intelligence, machine learning, algorithms, microstructural analysis.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:

Наукові праці у періодичних наукових виданнях, проіндексованих у наукометричній базі даних Scopus:

1. Korop, M. (2023). Machine learning in thermoelectric materials science. *Journal of Thermoelectricity*, (1), 44–54. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2023-1-44-54> (Scopus).

- Anatychuk, L., Korop, M. (2023). Application of machine learning to predict the properties of Bi_2Te_3 based thermoelectric materials. *Journal of Thermoelectricity*, (2), 59–71. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2023-2-59-71> (Scopus).

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка методології застосування машинного навчання, збір та підготовка навчальних даних, навчання моделей, аналіз отриманих результатів, написання статті; внесок Анатичука Л.: наукове керівництво, формулювання концепції дослідження, обговорення результатів.

- Anatychuk, L., Prybyla, A., Korop, M., Kiziuk, Y., Konstantynovych, I. (2024). Thermoelectric power sources using low-grade heat: Part 1. *Journal of Thermoelectricity*, (1-2), 90–96. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2024-1-2-90-96> (Scopus).

Внесок авторів: **Короп М.:** пошук та аналіз літературних джерел, участь у комп'ютерному моделюванні; внесок Анатичука Л.: ідея дослідження, наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Прибили А.: проведення комп'ютерного проектування, постановка дослідження, аналіз результатів; внесок Кізіюка Ю., Константиновича І.: проведення розрахунків та обговорення результатів.

- Anatychuk, L., Prybyla, A., Korop, M., Kiziuk, Y., Konstantynovych, I. (2024). Thermoelectric power sources using low-grade heat: Part 2. *Journal of Thermoelectricity*, (3), 36–43. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2024-3-36-43> (Scopus).

Внесок авторів: **Короп М.:** пошук та аналіз літературних джерел, участь у комп'ютерному моделюванні; внесок Анатичука Л.: ідея дослідження, наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Прибили А.: проведення комп'ютерного проектування, постановка дослідження, аналіз результатів; внесок Кізіюка Ю., Константиновича І.: проведення розрахунків та обговорення результатів.

5. Anatyshuk, L., Prybyla, A., Korop, M., Kiziuk, Y., Konstantynovych, I. (2024). Thermoelectric power sources using low-grade heat: Part 3. *Journal of Thermoelectricity*, (4), 61–68. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2024-4-61-68> (Scopus).

Внесок авторів: **Короп М.:** пошук та аналіз літературних джерел, участь у комп'ютерному моделюванні; внесок Анатичука Л.: ідея дослідження, наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Прибили А.: проведення комп'ютерного проектування, постановка дослідження, аналіз результатів; внесок Кізіюка Ю., Константиновича І.: проведення розрахунків та обговорення результатів.

6. Korop, M., Prybyla, A. (2025). Application of LLM to Search and Systematize the Properties of Thermoelectric Materials in Scientific Literature. *Journal of Thermoelectricity*, (1), 16–25. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2025-1-16-25> (Scopus).

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка методології застосування великих мовних моделей, реалізація алгоритмів пошуку та систематизації даних, аналіз результатів, написання статті; внесок Прибили А.: наукове керівництво, обговорення результатів, участь у формулюванні висновків.

7. Korop, M., Prybyla, A., Lysko, V., Pylypko, V., & Khalavka, Y. (2025). Computer Vision as a Tool for Correlation Analysis of Images of the Microstructure of Bi-Te-based Thermoelectric Materials. *Journal of Thermoelectricity*, (4), 64–75. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2025-4-64-75> (Scopus).

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка методології комп'ютерного зору, реалізація алгоритмів кореляційного аналізу мікроструктурних зображень, проведення обчислювальних експериментів, аналіз результатів, написання статті; внесок Прибили А.: наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Лиська В.: обговорення результатів; внесок Пилипко В.: керівництво вимірюванням

характеристик, обговорення результатів; внесок Халавки Ю.: співнаукове керівництво, керівництво вимірюванням характеристик, обговорення результатів.

8. Korop M., Prybyla A., and Lysko V. Optimization of spiral anisotropic thermoelectric sensors using machine learning algorithms. Proceedings of SPIE the International Society for Optical Engineering. 13813, *Seventeenth International Conference on Correlation Optics*, 138133A (10 November 2025) <https://doi.org/10.1117/12.3093323> (Scopus).

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка методології оптимізації, реалізація алгоритмів машинного навчання для оптимізації спіральних анізотропних сенсорів, аналіз результатів, написання статті; внесок Прибили А.: наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Лиська В.: обговорення результатів.

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

9. Korop M., Prybyla A., Lysko V., Methods, and equipment for optimization of Bi-Te based thermoelectric materials using artificial intelligence. Proceedings of the 41st International and 7th Asian Conference on Thermoelectrics (*ICT2025*), Sendai, Japan, 2025. P. 64. URL: https://ict2025.jp/item/ICT2025_Poster_abstract_protected.pdf.

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка методології із застосуванням штучного інтелекту для оптимізації термоелектричних матеріалів на основі Bi-Te, проведення досліджень, написання тез; внесок Прибили А.: наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Лиська В.: обговорення результатів.

10. Korop M., Prybyla A., Lysko V., Optimization of spiral anisotropic thermoelectric sensors using machine learning algorithms. *The 17th International Conference "Correlation Optics 2025"*, 8-12 September, Chernivtsi, Ukraine. https://zoom.us/jb/doc/_1Iq9kKFROCFhBOx6QCEPg/p/238129514086400.

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка методології оптимізації спіральних анізотропних термоелектричних сенсорів із застосуванням алгоритмів машинного навчання, написання тез; внесок Прибили А.: наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Лиська В.: обговорення результатів.

11. Korop M., Korop A., Vakulenko T., Khalavka Y., An extension of MNPBEM toolbox for the simulation of decahedral silver nanoparticles' electromagnetic properties. *The 17th International Conference "Correlation Optics 2025"*, 8-12 September, Chernivtsi, Ukraine. [https://zoom.us/wb/doc/jO1XWGTCT7Gcz7YDP-lghw/p/238328434720768](https://zoom.us/jb/doc/jO1XWGTCT7Gcz7YDP-lghw/p/238328434720768).

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка програмного розширення пакету MNPBEM для моделювання електромагнітних властивостей декаедричних наночастинок срібла; внесок Короп А.: експериментальний синтез наночастинок, написання тез, обговорення результатів; внесок Вакуленко Т.: математичний розрахунок форми наночастинок, співавторство тез; внесок Халавки Ю.: наукове керівництво, співавторство тез, обговорення результатів.

12. Korop M., Prybyla A., Lysko V., AI-Based methodology for predicting thermoelectric material performance from literature data. *XX International Freik Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems*, 6-10 October, Ivano-Frankivsk, Ukraine. С. 126. https://conference.pnu.edu.ua/icpttfn/wp-content/uploads/sites/10/2025/10/Abstract-book_-ICPTTFN-XX_2025.pdf.

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка AI-методології для прогнозування характеристик термоелектричних матеріалів на основі літературних даних, проведення досліджень, написання тез; внесок Прибили А.: наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Лиська В.: обговорення результатів.