

## **ВІДГУК**

офіційного опонента на дисертаційну роботу  
Чолак Ірини Володимирівни  
на тему «Визначення фізичних властивостей полімерних і  
композиційних матеріалів методами молекулярної  
динаміки і структурної механіки»,  
представлену на здобуття ступеня доктора філософії  
в галузі знань 13 «Механічна інженерія» за спеціальністю 131 «Прикладна  
механіка»

**Актуальність теми дисертації.** Полімерні та нанокompозиційні матеріали мають важливе значення для сучасної науки та техніки. Широкий спектр їх використання зумовлений рядом фізико-хімічних властивостей, які притаманні тільки цим матеріалам. Проте, стрімкий розвиток технологій вимагає постійного покращення якостей та функціональності і, як результат, глибшого розуміння фізико-механічних властивостей полімерів та нанокompозитів. Попри значні прориви та інновації у галузі полімерних матеріалів, розуміння основних фізичних принципів, що визначають поведінку цих матеріалів та їх властивості залишається недостатньо дослідженим питанням. Інтеграція відомих математичних теорій з сучасними обчислювальними можливостями допомагає наблизитися до розуміння поведінки складних молекулярних систем на нанорівні. Моделювання методами молекулярної динаміки стає потужним інструментом, що дає змогу досліджувати складні системи на атомістичному рівні.

Аналіз процесів та властивостей у полімерах та нанокompозитах перед їх синтезом дає можливість прогнозувати їх ефективність у вирішенні практичних завдань за допомогою моделювання поведінки матеріалів у реальних умовах експлуатації на молекулярному рівні. Встановлено, що наразі недостатньо досліджено вплив нефункціалізованих нанонаповнювачів з довільним їхнім розміщенням у полімерній матриці на комплекс фізико-механічних властивостей ПНКМ, потрібних для континуального моделювання термо-пружно-пластичного стану в умовах експлуатації.

Тому використання методів молекулярної динаміки на етапі створення нових нанокompозиційних матеріалів для визначення їхніх фізико-механічних властивостей та розвиток багатоступеневого підходу до комп'ютерного моделювання є безумовно актуальною проблемою.

**Оцінка обґрунтованості наукових результатів дисертації, їх достовірності та новизни.**

Наукова новизна результатів дисертаційного дослідження полягає в наступному:

- розвинуто комплексний підхід до визначення фізико-механічних властивостей полімерних та нанокомпозиційних матеріалів на основі числового аналізу зразків представницького об'єму методами молекулярної динаміки та структурної механіки.

- дані теоретичних досліджень фізико-механічних властивостей полімерних та нанокомпозиційних матеріалів, що включають модулі пружності й зсуву, коефіцієнт Пуассона, границю текучості, коефіцієнт лінійного температурного розширення, масову ізобарну теплоємність і теплопровідність.

- двопараметричні залежності для прогнозування ефективних фізико-механічних властивостей ПНКМ, що потрібні для оперативного визначення властивостей нанокомпозиційних матеріалів залежно від температури та об'ємної частки наповнювачів.

Достовірність отриманих результатів забезпечується використанням сучасних теоретичних методів дослідження, апробованих методик числових методів молекулярної динаміки і структурної механіки, а також багаторазовим повторенням числових експериментів для усунення похибок та перевірки стабільності результатів. Застосовано статистичну обробку даних, що дозволяє підтвердити репрезентативність отриманих показників. Теоретична база дослідження доповнюється порівняльним аналізом з існуючими літературними даними, що посилює об'єктивність висновків.

Обґрунтованість результатів підтверджується логічною послідовністю проведених досліджень: від підбору матеріалів та формування зразків — до аналізу їх властивостей та оцінки можливостей практичного застосування. Результати числових експериментів узгоджуються з теоретичними уявленнями про поведінку композитних матеріалів у полімерній матриці та підтверджують ефективність обраного підходу.

Отже, в дисертаційній роботі поставлене наукове завдання виконано повністю, здобувач повною мірою оволодів методологією наукової діяльності.

**Оцінка змісту дисертації, її завершеність та дотримання принципів академічної доброчесності.**

За своїм змістом дисертаційна робота здобувача Чолак І.В. повністю відповідає Стандарту вищої освіти зі спеціальності 131 «Прикладна механіка» та напрямкам досліджень відповідно до освітньої програми Прикладна механіка.

Дисертаційна робота є завершеною науковою працею і свідчить про наявність особистого внеску здобувача у науковий напрям «Прикладна механіка».

Розглянувши звіт подібності за результатами перевірки дисертаційної роботи на текстові співпадіння, можна зробити висновок, що дисертаційна робота Чолак Ірини Володимирівни є результатом самостійних досліджень здобувача і не містить елементів фальсифікації, компіляції, фабрикації, плагіату та запозичень. Використані ідеї, результати і тексти інших авторів мають належні посилання на відповідне джерело.

### **Мова та стиль викладення результатів**

Дисертаційна робота написана українською мовою.

Матеріал викладено послідовно та логічно, із чітким дотриманням структури наукової роботи: від постановки мети дослідження до формулювання висновків. Кожен розділ логічно впливає з попереднього, що сприяє цілісному сприйняттю інформації.

Стиль мовлення відповідає вимогам наукового стилю: використано об'єктивну, нейтральну лексику, уникається емоційність та суб'єктивні оцінки. Текст лаконічний, інформативний, з дотриманням норм академічної доброчесності.

Інформація подається доступною мовою, зрозумілою для фахівців відповідної галузі. Разом із тим, автор дотримується загальноприйнятої наукової термінології, що свідчить про професійний рівень викладення та орієнтацію на академічну аудиторію.

Використання ілюстративного матеріалу (таблиць, графіків, схем) додатково підсилює зміст тексту та робить його більш наочним. Обґрунтування гіпотез, аналіз результатів і формулювання висновків виконано чітко та аргументовано.

Загалом, текст відзначається високим рівнем академічної культури, науковою коректністю та стилістичною виваженістю.

Дисертація складається з вступу, 5 розділів, висновків, списку літератури та додатків. Загальний обсяг дисертації 176 сторінок.

У вступі обґрунтовано важливість обраної теми, її значення для науки та практики, наявність невирішених проблем у цій галузі.

У першому розділі проведено аналіз літературних джерел щодо полімерів та полімерних композитів, зокрема з наповнювачами типу вуглецевих нанотрубок (ВНТ) та графену. Розглянуто методи моделювання та дослідження властивостей нанокомпозитів. Обґрунтовано вибір матеріалів і підходів до числового моделювання, включно з використанням методу молекулярної динаміки та програмного забезпечення LAMMPS.

Другий розділ присвячено побудові початкових конфігурацій полімерних матриць (ПЕ) та їх наповнення ВНТ чи графеном; методам оптимізації геометрії та врівноваження систем; використанню різних типів термостатів і баростатів у процесі моделювання (Langevin, Nose–Hoover) для досягнення фізичної достовірності моделі.

Третій розділ висвітлює методологію розрахунку теплопровідності з використанням методу Гріна–Кубо; вплив типу наповнювачів (ВНТ, графен) і їх орієнтації, розміру, кількості на теплопровідність нанокompозитів; порівняння результатів числового моделювання з експериментальними та літературними даними.

У четвертому розділі наведено моделювання напружено-деформованого стану нанокompозитів; аналіз механічних властивостей систем залежно від концентрації наповнювача; оцінено вплив міжфазної взаємодії між полімером і нанонаповнювачем на характеристики міцності.

П'ятий розділ присвячений оцінці ефективності використання нанокompозитів у виробництві водопровідних труб, ємностей для хімікатів, пакувальної тари тощо. Наведено розрахунки економічної вигоди від зменшення маси та підвищення міцності та пропозиції щодо застосування 3D-друку з нанокompозитних матеріалів для виготовлення інженерних виробів.

Актуальність дослідження підтверджена сучасними потребами у високоефективних композитних матеріалах з покращеними теплопровідними та механічними властивостями. Обґрунтовано вибір методів дослідження – молекулярна динаміка дозволила на мікроскопічному рівні змодельовати полімерну матрицю та поведінку нанонаповнювачів. Доведено вплив концентрації, орієнтації та типу нанонаповнювача на теплопровідність і міцність полімерного нанокompозиту на основі поліетилену. Встановлено зв'язок між міжмолекулярною взаємодією та макроскопічними властивостями матеріалу, що відкриває шляхи до оптимізації складу композитів. Показано потенціал практичного використання отриманих результатів у реальних конструкційних виробках, зокрема у виробництві ємностей, пакувальної тари, труб і деталей, виготовлених за допомогою адитивних технологій.

Дисертаційна робота оформлена відповідно до вимог наказу МОН України від 12 січня 2017 р. № 40 «Про затвердження вимог до оформлення дисертації».

#### **Оприлюднення результатів дисертаційної роботи**

Наукові результати дисертації висвітлені у 16 наукових публікаціях здобувача, серед яких: 5 статті у наукових виданнях, включених на дату опублікування до переліку наукових фахових видань України; 1 патент України на корисну модель. Також результати дисертації були апробовані на 8 наукових фахових конференціях.

Наукові публікації свідчать про високий рівень теоретичної підготовки, володіння сучасними методами дослідження та глибоке розуміння актуальних проблем у сфері прикладної механіки. Тематика публікацій відповідає напряму дослідження та демонструє поступовий розвиток наукової думки, від постановки проблеми до практичної реалізації результатів.

У публікаціях простежується самостійність викладення матеріалу, аргументованість наукових висновків, коректне посилання на джерела інформації. Авторка дотримується загальноприйнятої наукової термінології, чітко формулює мету та завдання досліджень, логічно структурує текст та обґрунтовує результати.

Здобувач дотримується принципів академічної доброчесності, зокрема, коректно використовує джерела та посилання на праці інших дослідників, не виявлено фактів плагіату або самоплагіату, дотримується етичних норм у поданні результатів.

Публікації охоплюють як фахові видання, так і матеріали конференцій, що підтверджує активну наукову діяльність та зацікавленість у професійному зростанні.

Загалом, науковий доробок здобувача характеризується високим рівнем академічної якості та повною відповідністю вимогам до наукових публікацій у вищій освіті та науці. Наукові результати описані в дисертаційній роботі повністю висвітлені у наукових публікаціях здобувача.

#### **Недоліки та зауваження до дисертаційної роботи.**

1. Уся робота базується на комп'ютерному моделюванні методом молекулярної динаміки, без проведення власних експериментів для верифікації результатів. Верифікація моделі здійснюється порівнянням з літературними даними, однак власні фізико-механічні або термічні вимірювання відсутні. Доцільно було б додати хоча б обмежену експериментальну частину.
2. Хоча в п'ятому розділі заявлено про практичне застосування результатів, відсутній глибокий аналіз техніко-економічного обґрунтування впровадження. Немає прикладів або оцінки реальних підприємств, де ці матеріали можуть бути використані. Варто було б включити аналіз ринку або оцінку конкурентоспроможності розроблених рішень.
3. У деяких розділах наявна надмірна деталізація технічних процедур, що ускладнює сприйняття основних наукових висновків. Деякі фрагменти тексту потребують редагування для покращення наукового стилю, зменшення тавтології та уникнення надмірної кількості аббревіатур без пояснення.
4. Деякі графіки містять підписи осей та позначень англійською мовою.

Вважаю, що висловлені зауваження не є визначальними і не зменшують загальну наукову новизну та практичну значимість результатів та не впливають на позитивну оцінку дисертаційної роботи.

#### **Висновок про дисертаційну роботу**

Вважаю, що дисертаційна робота здобувача ступеня доктора філософії Чолак Ірини Володимирівни на тему «Визначення фізичних властивостей полімерних і композиційних матеріалів методами молекулярної динаміки і структурної механіки» виконана на високому науковому рівні, не порушує принципів академічної доброчесності та є закінченим науковим дослідженням, сукупність теоретичних та практичних результатів якого розв'язує наукове завдання, що має істотне значення для галузі знань 13 «Механічна інженерія».

Дисертаційна робота за актуальністю, практичною цінністю та науковою новизною повністю відповідає вимогам чинного законодавства України, що передбачені в п.6 – 9 «Порядку 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 2022 р. № 44.

Здобувач Чолак Ірина Володимирівна заслуговує на присудження ступеня доктора філософії в галузі знань 13 «Механічна інженерія» за спеціальністю 131 «Прикладна механіка».

#### Офіційний опонент:

Доцент кафедри хімічних технологій  
та ресурсозбереження Київського  
національного університету технологій  
та дизайну, д.т.н., проф.

/  /

Надія СОВА



«21» квітня 2025 року

  
Генеральний секретар

засвідчую

 Терлова Н.В.