

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.

Актуальність дисертаційної роботи Чолак Ірини Володимирівни зумовлена стрімким розвитком технологій та необхідністю глибшого розуміння фізико-механічних властивостей полімерів і нанокомпозитів. Полімерні та нанокомпозиційні матеріали є основою багатьох сучасних галузей науки і техніки, оскільки володіють унікальними фізико-хімічними властивостями, що визначають їхню ефективність та функціональність у різноманітних застосуваннях.

Попри значний прогрес у створенні та використанні полімерних матеріалів, фундаментальні принципи, що визначають їхню поведінку, залишаються недостатньо дослідженими. Це ускладнює прогнозування їх експлуатаційних характеристик та оптимізацію складу для конкретних практичних завдань. Сучасні методи комп'ютерного моделювання, зокрема молекулярна динаміка та структурна механіка, відкривають нові можливості для аналізу процесів на молекулярному рівні, що дозволяє отримувати точні дані про структуру, міцність та деформаційні властивості матеріалів.

Використання методів молекулярної динаміки дозволяє досліджувати складні системи на атомістичному рівні та оцінювати їхню поведінку за різних умов навантаження. Поєднання цих методів із підходами структурної механіки дає змогу створювати більш точні моделі матеріалів, що враховують як їх мікроструктурні особливості, так і макроскопічні характеристики. Такий підхід сприяє не лише кращому розумінню механізмів деформації та руйнування полімерних і композиційних матеріалів, але й оптимізації їх структури для підвищення експлуатаційних характеристик.

Таким чином, дослідження фізичних властивостей полімерних та композиційних матеріалів із використанням методів молекулярної динаміки і структурної механіки є актуальним науковим завданням. Це сприяє розвитку матеріалознавства, розширює можливості прогнозування поведінки матеріалів у реальних умовах експлуатації та дозволяє створювати нові високоефективні матеріали для різних сфер промисловості.

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.

- Отримано нові 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.

- Запропоновано двопараметричні залежності для прогнозування ефективних фізико-механічних властивостей полімерних та нанокомпозиційних матеріалів, що дозволяють оперативно визначати їх характеристики залежно від температури та об'ємної частки наповнювачів.

Достовірність отриманих в роботі результатів забезпечується використаними сучасними методиками прогнозування властивостей матеріалів та їх широкою апробацією в численних наукових роботах, де проведено обговорення даних моделювання структурних, механічних і теплових властивостей твердотільних матеріалів, включаючи наноструктури та нанокомпозити.

Аналіз дисертаційної роботи та наукових публікацій, на основі яких її підготовлено, свідчить про адекватний вибір методів досліджень, потенціалів міжатомної взаємодії, а підхід автора до аналізу даних є ретельним та коректним. Вагомим підтвердженням достовірності результатів дисертаційної роботи є публікація основних її результатів в авторитетних наукових виданнях з обов'язковим анонімним рецензуванням.

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 Ірини Володимирівни повністю відповідає Стандарту вищої освіти зі спеціальності 131 «Прикладна механіка» та напрямкам досліджень відповідно до освітньої програми «Прикладна механіка» та «Інжиніринг пакування та пакувального обладнання».

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 співпадиння, 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.

Дисертаційна робота складається зі вступу, 5 розділів, загальних висновків, списку використаних джерел і додатків. Загальний обсяг дисертації складає 176 сторінок.

У вступі обґрунтовано актуальність теми дисертаційного дослідження, а також визначено мету роботи, її зв'язок з науковими темами і програмами, сформульовано основні задачі дослідження, охарактеризовано новизну і практичне значення наукових результатів. Також наведено інформацію про особистий внесок здобувача та апробацію результатів дисертаційного дослідження.

У першому розділі представлено огляд стану досліджень у світі за тематикою дисертаційного дослідження. Зокрема, викладено результати досліджень фізико-механічних властивостей полімерних та композиційних матеріалів. Описано програмне забезпечення та потенціали міжатомної взаємодії, що використовуються для моделювання полімерів та полімерних наноконпозиційних матеріалів методами молекулярної динаміки, розглянуто взаємозв'язок між методами молекулярної динаміки та структурної механіки.

У другому розділі представлено результати молекулярно-динамічного моделювання фізико-механічних властивостей поліетилену та наноконполітів поліетилен-вуглецеві нанотрубки і поліетилен -графен. Встановлено, що при додаванні вуглецевих нанотрубок чи графену до полімеру має місце зміна модуля пружності та межі плинності композиту, величина якого залежить від типу і концентрації наповнювача, а також температури.

У третьому розділі роботи викладено результати молекулярно-динамічного моделювання теплофізичних властивостей наноконполітів поліетилен-вуглецеві нанотрубки і поліетилен -графен, зокрема, теплопровідності, масової ізобарної теплоємності, коефіцієнта лінійного температурного розширення та температури склування. Встановлено, що при вмісті наповнювача на рівні 1,36%-2,08% зміна

теплопровідності композиту становить до 44-54%. Проведено порівняння даних молекулярної динаміки з відповідними результатами, отриманими за теоретичними залежностями для композиційних матеріалів. Виявлено також збільшення масової ізобарної теплоємності та коефіцієнта лінійного температурного розширення композитів з нанотрубками чи графеном. При цьому температура склування зростає зі збільшенням частки наповнювача в композитах з нанотрубками і, навпаки, зменшується при використанні графену в якості наповнювача.

У четвертому розділі сформульовано математичні та розроблено відповідні числові моделі задач напружено-деформованого стану для моделювання випробувань нанокомпозиційних матеріалів у наближенні ізотропного середовища. Представлено результати досліджень ефективних механічних властивостей нанокомполітих поліетилен-вуглецеві нанотрубки з різною об'ємною часткою та довільним розташуванням функціоналізованих нанотрубок різної довжини в полімерній матриці. Показано, що функціоналізація коротких нанотрубок у нанокомполіті не призводить до підвищення модуля пружності.

У п'ятому розділі сформульовано інструменти у вигляді математичних моделей, методик теоретичних досліджень фізико-механічних властивостей полімерних матеріалів методами молекулярної динаміки і структурної механіки та розрахунку пакувань, в яких застосовуються полімерні нанокомпозиційні матеріали. Розроблено рекомендації щодо використання полімерних нанокомпозиційних матеріалів у промисловому виробництві та пакувальній індустрії. Також визначено ефективність застосування нанокомполіту поліетилен-вуглецеві нанотрубки у трубах для водопостачання та ємностях для зберігання хімікатів за допомогою відповідних порівняльних розрахунків напружено-деформованого стану.

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 статей у наукових виданнях, включених на дату опублікування до переліку наукових фахових видань України; 2 статті в інших виданнях, 8 доповідей у збірниках доповідей науково-практичних конференцій (1 міжнародна, входить до наукометричної бази Scopus), 1 патент України на корисну модель.

Також результати дисертації були апробовані на 8 наукових фахових конференціях.

Розгляд наукових публікацій, підготовлених за результатами дисертаційного дослідження, веде до висновку, що їх науковий рівень є високим, а основні висновки роботи відображені в опублікованих працях. Публікація результатів роботи в журналах, що передбачають процедуру анонімного рецензування, є додатковим свідченням того, що робота не містить проявів порушень академічної доброчесності. Крім того, результати дисертаційного дослідження неодноразово доповідалися на престижних наукових конференціях, тобто пройшли детальне обговорення серед фахівців в обраній галузі.

Таким чином, наукові результати описані в дисертаційній роботі повністю висвітлені у наукових публікаціях здобувача.

Недоліки та зауваження до дисертаційної роботи.

1. В розділі 2.2 наведено опис методики врівноваження молекулярних моделей. Однак в тексті не зазначено, що слугувало критерієм досягнення системою рівноважного стану. З яких міркувань обиралися часи витримки моделей в умовах *NVT*- чи *NPT*-ансамблю?

2. В тексті не наведено аргументів, чому функціональні нелінійні двопараметричні залежності механічних і теплових властивостей досліджуваних композитів від температури та об'ємної частки наповнювача мають вигляд, представлений рівнянням (2.4)? Чим обумовлений вибір кількості доданків під знаком суми в цьому рівнянні?

3. Для розрахунків кривих напруження-деформація в роботі використано швидкість деформації 10^9 s^{-1} . Відомо, що цей параметр може суттєво впливати на результати молекулярно-динамічного моделювання, тому варто було б додатково дослідити зазначений вплив хоча б для одного з модельних зразків.

4. Із тексту дисертації не зрозуміло, як проводилася статистична обробка даних, зокрема, при розрахунку теплопровідності методом рівноважної молекулярної динаміки. Доцільним було б для окремих моделей навести в роботі типові часові залежності автокореляційних функцій теплового потоку і коефіцієнта теплопровідності, розрахованого на їх основі.

5. В розділі 4 показано, що армування поліетилену вуглецевими нанотрубками більшої довжини є ефективнішим, ніж при використанні коротших нанотрубок. Але фізичні механізми виявленої закономірності в тексті майже не обговорюються.

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 «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 в галузі знань 13 «Механічна інженерія» за спеціальністю 131 «Прикладна механіка».

Офіційний опонент:

Завідувач кафедри фізики металів
Київського національного університету
імені Тараса Шевченка,
кандидат фізико-математичних наук, доцент



Василь КУРИЛЮК

М.П.

«18» квітня 2025 року

