

РЕЦЕНЗІЯ
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.

У сучасній промисловості полімерні нанокомпозиційні матеріали використовуються дуже широко. Їхнє широке застосування пояснюється особливими фізико-хімічними, фізико-механічними властивостями та відносною дешевизною. Однак, прогрес вимагає постійного поліпшення їх функціональних характеристик, що обумовлює необхідність кращого розуміння природи їх властивостей. Незважаючи на значні успіхи в розробці полімерів, фундаментальне розуміння фізичних принципів, які визначають їхню поведінку та властивості при поєднанні з іншими матеріалами, потребує подальшого вивчення. Об'єднання сучасних обчислювальних можливостей з фундаментальними математичними теоріями дозволяє наблизитися до розуміння складних процесів, які відбуваються в таких матеріалах. А комп'ютерне моделювання, правильно проведене на декількох масштабних рівнях, дозволяє адекватно прогнозувати функціональні властивості за різних умов експлуатації. Отже, поставлена задача по визначенню властивостей полімерних та композиційних матеріалів методами комп'ютерного моделювання є актуальною, як з наукової, так і з практичної точок зору.

Оцінка обґрунтованості наукових результатів дисертації, їх достовірності та новизни.

Наукова новизна результатів дисертаційного дослідження полягає в наступному:

1) 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;

2) 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;

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

Новизна відображена в усіх пунктах забезпечена детальним аналізом літературних даних проведеним автором в літературному огляді та перевіркою тексту дисертації на плагіат. Крім того, новизна отриманих результатів підтверджена і гарантована рецензіями на статті автора, 5 наукових статей опубліковані в наукових фахових виданнях України категорії Б, 2 статті в інших виданнях. Крім того, результати наведені в дисертації пройшли апробації на 8-ми конференціях за напрямком проведених автором досліджень, з яких 1 міжнародна, входить до наукометричної бази Scopus. Отриманий 1 патент України на корисну модель, також свідчить про новизну отриманих результатів.

Достовірність отриманих здобувачем результатів забезпечена тим, що теоретичні дослідження ґрунтуються на фундаментальних положеннях молекулярної динаміки і механіки суцільного середовища, які пройшли опробування багатьма світовими науковцями і десятиліттями використовуються для дослідження властивостей матеріалів. Всі використані гіпотези і математичні моделі апробувались і перевірялись здобувачем на адекватність, всі розроблені числові моделі були верифіковані. Крім того, достовірність отриманих результатів забезпечена сучасними комп'ютеризованими методами їх обробки, а отриманні результати беззаперечно відповідають сучасним науковим засадам.

Наукові дослідження були виконані здобувачем на кафедрі хімічного, полімерного та силікатного машинобудування КПІ ім. Ігоря Сікорського в рамках ініціативної теми «Підвищення енерго- і ресурсозберігаючих показників в технології та обладнанні об'єктів хімічного, полімерного та силікатного машинобудування» (номер державної реєстрації 0122U201697) під керівництвом професора кафедри хімічного, полімерного та силікатного машинобудування, доктора технічних наук, професора Карвацького Антона Яновича.

Отже, в дисертаційній роботі поставлене наукове завдання визначення фізико-механічних властивостей полімерів та наноконпозиційних матеріалів з полімерною матрицею та їх застосування в промисловому виробництві, для чого слід:

1) Проаналізувати сучасний стан і тенденції розвитку теоретичних досліджень фізико-механічних властивостей полімерних та наноконпозиційних

матеріалів (ПНКМ) методами молекулярної динаміки та структурної механіки, обґрунтувати вибір методів дослідження.

2) Виконати теоретичні дослідження механічних та теплофізичних властивостей ПНКМ типу ПЕ-ВНТ і ПЕ-графен методами молекулярної динаміки. Отримати двопараметричні залежності механічних та теплофізичних властивостей від температури та об'ємної частки наповнювачів для оперативного прогнозування ефективних фізико-механічних властивостей полімерних нанокомпозиційних матеріалів.

3) На основі теорії структурної механіки сформулювати математичні моделі задач напружено-деформованого стану (НДС) для моделювання випробувань нанокомпозиційних матеріалів типу ПЕ-ВНТ з функціоналізованими ВНТ у наближенні ізотропного середовища.

4) Розробити числові моделі для розв'язання задач НДС для визначення ефективних механічних властивостей ПНКМ типу ПЕ-ВНТ з функціоналізованими ВНТ різної довжини. Дослідити сіткову збіжність розроблених числових моделей методом подвійного перерахунку. Виконати числові експерименти з визначення ефективних механічних властивостей полімерних нанокомпозиційних матеріалів.

5) Виконати верифікацію отриманих даних з фізико-механічних властивостей ПЕ і полімерних нанокомпозиційних матеріалів.

6) Розробити рекомендації щодо використання полімерних нанокомпозиційних матеріалів у промисловому виробництві та пакувальній індустрії.

Поставлене 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 галузі знань 13 Механічна інженерія 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 – «Нові речовини і матеріали».

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. Текст дисертаційної роботи викладено доступно, з дотриманням науково-технічного стилю мовлення, з використанням загальноприйнятої наукової термінології та відповідними посиланнями на роботи інших вчених відповідного наукового напрямку. Дисертація складається з вступу, 5 розділів, висновків, списку літератури та додатків. Загальний обсяг дисертації 176 сторінок.

У вступі представлено: актуальність теми дослідження властивостей полімерних нанокомпозитних матеріалів; зв'язок проведених досліджень з науковими програмами; основну мету і завдання роботи; об'єкт та предмет дослідження; методи дослідження, які були використанні в роботі. Представлені, три обґрунтованих формулювання, що висвітлюють новизну, отриманих здобувачем результатів та зазначена їх практична цінність, включаючи особистий внесок здобувача.

У першому розділі на основі аналізу сучасного стану досліджень фізико-механічних властивостей полімерних та композиційних матеріалів які були проведені числовими методами моделювання встановлено, що такий підхід дає змогу дослідити поведінку матеріалів в наближених до реальних умовах експлуатації та визначити доцільність їхнього виробництва ще на етапі розробки. Представлені переваги та недоліки використання методу молекулярної динаміки для моделювання таких систем. Представлені результати розгляду взаємозв'язку між методами молекулярної динаміки та структурної механіки через багатоступеневий (мультимасштабний) підхід до комп'ютерного моделювання який розширює можливості моделювання. Також встановлено, що використання багатоступеневого (мультимасштабного) підходу є економічно вигідним за рахунок зменшення використання комп'ютерних потужностей та розширює часові та просторові границі досліджуваних систем.

За результатами проведеного огляду встановлено, що наразі недостатньо досліджено вплив нефункціалізованих нанонаповнювачів з довільним їхнім розміщенням у полімерній матриці на комплекс фізико-механічних властивостей полімерних нанокомпозитних матеріалів, потрібних для континуального моделювання термо- пружно-пластичного стану в умовах експлуатації. Тому використання методів молекулярної динаміки на етапі створення нових нанокомпозиційних матеріалів для визначення їхніх фізико-механічних властивостей є безумовно актуальною проблемою.

На підставі проведеного літературного огляду обґрунтовано актуальність дисертаційної роботи та сформульовано її мету та завдання.

У другому розділі представлені результати теоретичних досліджень механічних характеристик отриманих методом молекулярної динаміки на всіх етапах моделювання. Першим етапом було отримання врівноважених молекулярних структур п'яти різних структурних конфігурацій і визначення їх щільності. На другому етапі для визначення механічних характеристик (модуль пружності, коефіцієнт Пуассона, модуль зсуву та границю текучості) для отриманих врівноважених структур проводилось моделювання пружно-пластичної деформації за температур 275 К, 300 К і 325 К. На наступному етапі проходила верифікація отриманих результатів, яка показала що отримані дані або збігаються з наявними літературними даними, або наближені до них. На етапі аналізу даних були проведені порівняння механічних характеристик та для зручності використання оформленні двопараметричні залежності механічних характеристик досліджуваних систем у діапазоні зміни температур (280 – 320) К та об'ємної частки наповнювачів (0 – 2,0) % і (0 – 1,5) % для систем «поліетилен – вуглецеві нанотрубки» та «поліетилен – графен» відповідно, що має практичну цінність і дозволяє під час розробки нових композиційних матеріалів не виконувати достатньо складні й тривалі числові експерименти з використанням МД моделювання.

У третьому розділі представлені результати теоретичних досліджень теплофізичних властивостей (теплопровідність, масова ізобарна теплоємність, коефіцієнт лінійного теплового розширення та температура склування) досліджуваних систем отриманих методом молекулярної динаміки. Верифікація отриманих даних теплопровідності шляхом порівняння поточних даних з експериментом показала, що різниця між експериментом і даними МД моделювання не перевищує 5 %, що свідчить про достовірність результатів.

Показано, що додавання вуглецевих нанотрубок і листів графену збільшує величину ефективної теплопровідності матриці з поліетилену на (44 – 54) % за температури 293 К і за об'ємної частки вуглецевих нанотрубок 2,08 % і графену – 1,36 %, відповідно. Це пояснюється впливом нанодомішок у матриці поліетилену на впорядкованість його структури, та тим що вони призводять до збільшення середнього вільного діапазону дифузії фононів та ослаблення їх розсіювання.

Представлені результати порівняння теплофізичних властивостей молекулярних моделей досліджуваних систем на масову ізобарну теплоємність та коефіцієнт лінійного температурного розширення. Осереднені на заданих часових проміжках результати, показали збіжність з літературними даними та ще раз довели достовірність отриманих теплофізичних властивостей нанокомпозитів. А отриманні за цими результатами двопараметричні

залежності теплофізичних властивостей систем «поліетилен – вуглецеві нанотрубки» та «поліетилен – графен» (теплопровідності, масової ізобарної теплоємності та КЛТР) у діапазоні температур (280 – 320) К та об'ємної частки наповнювачів (0 – 2,5) %, дозволяють під час розробки нових композиційних матеріалів не виконувати достатньо складні й тривалі числові експерименти з використанням МД моделювання.

Також у розділі представлені результати визначення температур склування досліджуваних матеріалів на підставі аналізу їхніх функціональних залежностей зміни об'єму від температури. Встановлено, що отримані температури склування дають значно вищі значення у порівнянні з практичними експериментами, що пов'язано зі значно більшою швидкістю охолодження/нагрівання зразків під час моделювання аніж в реальності.

Одержані теплофізичні властивості разом з механічними (з попереднього розділу) є практично важливими даними, які дозволять виконувати моделювання термо-пружно-пластичного стану виробів з наноккомпозитів «поліетилен – вуглецеві нанотрубки» та «поліетилен – графен» в умовах експлуатації в континуальному наближенні.

У четвертому розділі викладено результати моделювання ефективних механічних властивостей наноккомпозитів «поліетилен – вуглецеві нанотрубки» на континуальному рівні в залежності від довжини вуглецевих нанотрубок. Доведено, що додавання «довгих» вуглецевих нанотрубок значно покращує механічні характеристики поліетилену. Отримані характеристики є важливими з точки зору проєктування виробів з досліджуваних матеріалів.

П'ятий розділ присвячений практичному застосуванню полімерних наноккомпозиційних матеріалів в промисловості для виготовлення труб та ємностей для зберігання хімікатів. Зроблено порівняння ефективності при використанні поліетилену та поліетилену з додаванням вуглецевих нанотрубок у виготовленні цих виробів.

Представлено рекомендації щодо вибору для використання матеріалів при 3D-друці методом пошарового наплавлення, які були зроблені на основі результатів роботи. Слід відмити, що розроблені технічні рішення захищені патентом України на корисну модель, що також свідчить про високу практичну цінність роботи.

Зроблені в роботі висновки логічно витікають з усього масиву експериментальних результатів, узагальнених на високому науковому рівні.

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; 1 патент України на корисну модель.

Також результати дисертації були апробовані на 8 наукових фахових конференціях.

Рівень публікацій здобувача достатньо високий. Здобувачу належить вагомий внесок до кожної із них, про що свідчить авторський колектив публікацій в яких представлені основні результати, який складається виключно із самого здобувача та її наукового керівника. Ознак порушення академічної доброчесності як у публікаціях так і роботі здобувача не спостерігається. Всі отримані практичні результати є або унікальними, або були опубліковані цими ж авторами раніше і мають відповідно оформлені посилання.

Здобувачу належить вагомий внесок до кожної із вказаних 5 публікацій. Таким чином, наукові результати описані в дисертаційній роботі повністю висвітлені у наукових публікаціях здобувача.

Недоліки та зауваження до дисертаційної роботи.

Поряд з відміченими вище високим науковим рівнем, важливістю і практичним значенням результатів, отриманих автором дисертації, є ряд зауважень.

1) В першому пункті наукової новизни написано, що розвинуто комплексний підхід, але не зазначається який саме. Доречним було б зазначити у цьому пункті особливості та унікальності використаних в роботі підходів.

2) В другому пункті наукової новизни не зазначені для яких саме полімерних та наноконпозиційних матеріалів визначались фізико-механічні характеристики. Це зрозуміло з тексту роботи, але на мою думку пункти наукової новизни повинні бути самодостатніми.

3) В третьому пункті новизни також не вказані конкретно для яких саме полімерних наноконпозиційних матеріалів і з якими саме наповнювачами були отриманні двопараметричні залежності.

4) На рисунку 4.2 є посилання на публікації, які не відповідають переліку використаної літератури, а відповідають списку посилань в публікації з якої був взятий цей рисунок. Посилання на цю статтю присутнє. Але необхідно було в описі до рисунку перенаправити присутні посилання на нові, або якимось чином виправити цю ситуацію.

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 механічної інженерії. 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.

Рецензент:

Доцент кафедри фізичного
матеріалознавства та
термічної обробки
КПІ ім. Ігоря Сікорського,
кандидат технічних наук

М.П.

«22» квітня 2025 року



Сергій КОНОРЕВ

