

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.

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. Таким чином, дослідження фізико-механічних властивостей полімерних матеріалів та нанокompозитів за допомогою комп'ютерного моделювання є актуальним завданням, що має велике теоретичне та практичне значення для проведення досліджень у континуальному наближенні.

Оцінка обґрунтованості наукових результатів дисертації, їх достовірності та новизни.

Наукова новизна результатів дисертаційного дослідження полягає в наступному:

1. Розвинуто комплексний підхід визначення фізико-механічних властивостей полімерних нанокompозиційних матеріалів (ПНКМ) методами молекулярної динаміки та структурної механіки.

2. Отримано дані теоретичних досліджень комплексу фізико-механічних властивостей полімерних нанокompозиційних матеріалів (типу поліетилен-вуглецеві нанотрубки (ПЕ-ВНТ) та ПЕ-графен) за різної температури та об'ємної частки наповнювачів, що включають модулі пружності й зсуву, коефіцієнт Пуассона, границю текучості, коефіцієнт лінійного температурного розширення, масову ізобарну теплоємність і теплопровідність.

3. Отримано двопараметричні функціональні залежності для прогнозування ефективних фізико-механічних властивостей ПНКМ, що потрібно для оперативного визначення властивостей полімерних нанокompозиційних матеріалів залежно від температури та об'ємної частки наповнювачів.

Достовірність та обґрунтованість отриманих наукових результатів забезпечується використанням достовірних гіпотез та адекватних математичних моделей, застосуванням апробованого математичного апарату числових методів молекулярної динаміки і методу скінченних елементів, верифікацію

отриманих даних з фізико-механічних властивостей ПЕ і ПНКМ. Обговорення результатів дисертації проведено на багатьох національних та міжнародних конференціях, в яких приймав участь здобувач.

Наукові дослідження були виконані здобувачем на кафедрі хімічного (ХПСМ), полімерного і силікатного машинобудування КП ім. Ігоря Сікорського в рамках НДР – ініціативної теми «Підвищення енерго- і ресурсозберігаючих показників в технології та обладнанні об'єктів хімічного, полімерного і силікатного машинобудування», 2022–2027 рр., № ДР 0122U201697 під керівництвом професора кафедри ХПСМ, доктора технічних наук, професора, старшого наукового співробітника Карвацького Антона Яновича.

Отже, в дисертаційній роботі поставлене наукове завдання визначення фізико-механічних властивостей полімерних і композиційних матеріалів методами молекулярної динаміки та структурної механіки перед їхнім синтезом, що необхідно для прогнозування їхньої ефективності при вирішенні конкретних завдань в умовах експлуатації наближених до реальних, 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. У тексті дисертації застосовано чинну науково-технічну термінологію, витримано лексичні норми сучасної наукової мови. Стиль викладення матеріалу, наукових досліджень і положень, висновків і рекомендацій є переконливим і забезпечує доступність їх сприйняття.

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

У вступі здобувач обґрунтував актуальність теми дисертації, показав зв'язок роботи з науковими програмами і темами, сформулював мету, для досягнення якої поставив 6 задач дослідження, описав об'єкт, предмет та методи дослідження, сформулював наукову новизну отриманих результатів та їх практичне значення, вказав свій особистий внесок, інформацію про апробацію результатів роботи, включаючи публікації.

У першому розділі проведено аналітичний огляд сучасного стану досліджень фізико-механічних властивостей полімерних та композиційних матеріалів. Розглянуто програмне забезпечення та ряд силових полів, що використовуються для моделювання полімерів та полімерних нано-композиційних матеріалів методами молекулярної динаміки (МД), методи побудови молекулярних систем полімерів та композитів їх основі, способи врівноваження молекулярних моделей та подальшого моделювання фізико-механічних властивостей матеріалів. Показано, що методи числового моделювання є потужними інструментами для мінімізації витрати матеріальних ресурсів та тривалості розробки нових матеріалів, зокрема нанокомпозитів. Розглянуто взаємозв'язок між методами молекулярної динаміки та структурної механіки через багатоступеневий підхід до комп'ютерного моделювання для розширення можливостей моделювання. Встановлено, що використання багатоступеневого підходу сприяє зменшенню до обчислювальних ресурсів 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 ПНКМ, потрібних для континуального моделювання термо-пружно-пластичного стану в умовах експлуатації. За результатами літературного огляду обґрунтовано актуальність дисертаційної роботи та сформульовано її мету, завдання дослідження. Сформовано висновки до розділу.

У другому розділі представлено результати теоретичних досліджень механічних властивостей поліетилену (ПЕ) та ПНКМ типу ПЕ-ВНТ і ПЕ-графен методами молекулярної динаміки. З використанням програми LAMMPS проведено молекулярно-динамічне моделювання фізико-механічних властивостей поліетилену. Результати верифікації молекулярної моделі ПЕ показали, що отримані дані МД моделювання або збігаються з наявними літературними даними, або наближені до них. За аналогічними алгоритмами проведено теоретичні дослідження механічних властивостей нанокомпозитів ПЕ-ВНТ і ПЕ-графен методами молекулярної динаміки. Отримано нелінійні двопараметричні залежності механічних властивостей ПЕ-ВНТ і ПЕ-графен у діапазоні зміни температур (280–320) К та об'ємної частки наповнювачів (0–2,0) % і (0–1,5) % відповідно. Сформовано висновки до розділу.

У третьому розділі наведено результати визначення теплофізичних властивостей композиційних матеріалів ПЕ-ВНТ і ПЕ-графен з поліетиленовою матрицею методами молекулярної динаміки, що включають: теплопровідність, масову ізобарну теплоємність, коефіцієнт лінійного температурного розширення (КЛТР) та температуру склування. Виконано порівняння даних МД моделювання ефективної теплопровідності ПЕ-ВНТ і ПЕ-графен з відповідними даними розрахованими за теоретичними залежностями для композиційних матеріалів. Встановлено, що теоретичні залежності дають занижені на (6–26) % значення ефективної теплопровідності порівняно з МД моделюванням. При цьому розбіжність між значеннями теплопровідності зростає зі збільшенням об'ємної частки ВНТ. Отримано нелінійні двопараметричні залежності теплофізичних властивостей ПЕ-ВНТ і ПЕ-графен у діапазоні зміни температур (280–320) К та об'ємної частки наповнювачів (0–2,0) % і (0–1,5) % відповідно. Сформовано висновки до розділу.

У четвертому розділі представлено результати визначення механічних властивостей полімерних композиційних матеріалів типу пе-внт методами структурної механіки. Сформульовано математичні та розроблено відповідні числові моделі задач напружено-деформованого стану для моделювання випробувань нанокомпозиційних матеріалів типу ПЕ-ВНТ з функціоналізованими ВНТ у наближенні ізотропного середовища. Виконано дослідження ефективних механічних властивостей нанокомпозитів ПЕ-ВНТ з різною об'ємною часткою та довільним розташуванням функціоналізованих ВНТ різної довжини в полімерній матриці. Досліджено сіткову збіжність розроблених числових моделей методом подвійного перерахунку. Встановлено, що за даними числового моделювання похибка визначення модуля пружності не перевищує 0,2 %, а коефіцієнта Пуассона – 0,023 %. Сформовано висновки до розділу.

У п'ятому розділі розроблено рекомендації щодо використання полімерних нанокопозиційних матеріалів у промисловому виробництві та пакувальній індустрії. Визначено ефективність застосування нанокомпозиту ПЕ-ВНТ замість ПЕ у трубах для водопостачання та ємностях для зберігання хімікатів за допомогою відповідних порівняльних розрахунків напружено-деформованого стану. Запропоновано для 3D-друку методом пошарового наплавлення використовувати прутки з нанокомпозиту ПЕТГ-ВНТ (де ПЕТГ модифікація поліетилентерефталату з додаванням гліколю, що є більш міцним і термостійким, ніж звичайний ПЕТ). Використання прутка ПЕТГ-ВНТ буде сприяти поліпшенню механічних властивостей 3D-друкованих виробів порівняно з ПЕТГ і, зокрема, пакувальної тари, виготовленої просторовим друком, та покращенню адгезії між шарами стренги у виробках. Сформовано висновки до розділу.

Висновки і практичні рекомендації повністю відповідають проведенням дослідженням, змістовні та мають суттєве теоретичне та практичне значення.

У додатках наведено параметри силового поля Dreiding, документи, що підтверджують впровадження результатів досліджень та список публікацій здобувача за темою дисертації.

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.

Особистий внеском здобувача в статтях у співавторстві включав: критичний аналіз сучасного стану проблеми застосування молекулярно-динамічного моделювання для визначення фізико-хімічних властивостей полімерних та композитних матеріалів; розробку початкових конфігурацій молекулярних систем поліетилену та полімерних нанокомпозитів типу поліетилен-ВНТ; проведення врівноваження початкових конфігурацій та здійснення продуктивного моделювання їхніх ефективних фізико-механічних властивостей; отримано нелінійні двопараметричні залежності вказаних властивостей залежно від температури та об'ємної частки ВНТ, виконано аналіз отриманих результатів.

На підставі аналізу оприлюднення результатів роботи, вважаю, що описані в дисертаційній роботі наукові результати повністю висвітлені у наукових публікаціях здобувача. Принципи академічної доброчесності вважаю дотриманими.

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

Недоліки та зауваження до дисертаційної роботи.

1. У тексті дисертації недостатньо чітко описані геометричні параметри елементів молекулярних моделей, що ускладнює розуміння будови моделей.
2. Недостатньо обґрунтована гіпотеза щодо впливу функціоналізації ВНТ на фізико-механічні властивості полімерних нанокомпозиційних матеріалів, а саме причини зниження модуля пружності нанокомпозиту армованого функціоналізованими ВНТ, довжина яких менша за довжину репрезентативної комірки (8,13 нм) порівняно з

використанням нефункціоналізованих ВНТ як наповнювача для композиту.

3. Не вказано, які дефекти присутні у ВНТ.

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 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 «Механічна інженерія» за спеціальністю 131 «Прикладна механіка».

Рецензент:

професор кафедри хімічного,
полімерного і силікатного
машинобудування
КПІ ім. Ігоря Сікорського»,
доктор технічних наук,
професор



Олександр ГОНДЛЯХ

М.П.

« 22 » квітня 2025 року

