

ЗАТВЕРДЖУЮ

Проректор з навчальної роботи
Національного технічного
університету України

“Київський політехнічний інститут
імені Ігоря Сікорського”

к.т.н., доц.

Тетяна ЖЕЛЯСКОВА



14 " жовтня " 2025 р.

з протоколу № 10 від 05 лютого 2025 р. розширеного засідання
кафедри хімічного, полімерного і силікатного машинобудування
Національного технічного університету України
“Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського”

БУЛИ ПРИСУТНІ:

- з кафедри хімічного, полімерного і силікатного машинобудування (ХПСМ):
завідувач кафедри, д.т.н, доцент Сокольський О. Л.; декан ІХФ, д.т.н.,
професор Панов Є.М.; професор, д.т.н., професор Гондлях О. В.; професор,
к.т.н., професор Сівецький В. І.; професор, д.т.н., професор Мікульонюк І. О.;
професор, д.т.н., професор Карвацький А. Я.; професор, д.т.н., професор
Щербина В. Ю.; доцент, к.т.н., доцент Сідоров Д. Е.; доцент, к.т.н., доцент
Васильченко Г. М.; доцент, к.т.н., доцент Шилович Т. Б.; доцент, к.т.н.,
доцент Шилович І. Л.; доцент, к.п.н., доцент Казак І. О.; доцент, к.т.н.
Чемерис А. О.; асистент, доктор філософії Витвицький В.М.; асистент,
доктор філософії, Швачко Д. Г.; ст. викладач Борщик С. О.; асистент
Гур'єва Л.Н.; асистент Діденко Л.В.; аспірант Чолак І.В.

- з кафедри машин і апаратів хімічних та нафтопереробних виробництв:
завідувач кафедри, к.т.н, доцент Степанюк А.Р.; професор, д.т.н., професор
Корнієнко Я.М.; доцент, к.т.н., доцент Семінський О.О.; доцент, к.т.н.,
доцент Гулієнко С.В.; доцент, к.т.н., доцент Швед М.П.; асистент
Подиман Г.С.;

- з інших кафедр КПІ ім. Ігоря Сікорського:

з кафедри екології та технології рослинних полімерів: професор, д.т.н.,
професор Іваненко О. І.; аспірант Тетерятников Г. В.;

з кафедри динаміки і міцності машин та опору матеріалів: професор, д.т.н.,
професор Кришук М.Г.;

з кафедри технічних та програмних засобів автоматизації: доцент, к.т.н.,
доцент Коржик М.В.;
з кафедри фізичного матеріалознавства та термічної обробки: доцент, к.т.н.,
доцент Конорев С. І.

СЛУХАЛИ:

1. Повідомлення аспіранта кафедри хімічного, полімерного і силікатного машинобудування Чолак Ірини Володимирівни за матеріалами дисертаційної роботи “Визначення фізичних властивостей полімерних і композиційних матеріалів методами молекулярної динаміки і структурної механіки”, поданої на здобуття ступеня доктора філософії з галузі знань 13 «Механічна інженерія» за спеціальністю 131 «Прикладна механіка».

Освітньо-наукова програма «Прикладна механіка».

Тему дисертаційної роботи “Визначення фізичних властивостей полімерних і композиційних матеріалів методами молекулярної динаміки і структурної механіки” затверджено на засіданні Вченої ради інженерно-хімічного факультету (протокол № 9 від “01” листопада 2021 року).

Науковим керівником затверджений д.т.н., професор Карвацький А. Я.

2. Запитання до здобувача.

Запитання по темі дисертації ставили: д.т.н., професор Корнієнко Я.М.; д.т.н., професор Панов Є.М.; д.т.н., доцент Сокольський О.Л.; д.т.н., професор Гондляр О. В.; д.т.н., професор Крищук М.Г.

3. Виступи за обговореною роботою.

В обговоренні дисертації взяли участь: д.т.н., професор Гондляр О. В.; д.т.н., професор Панов Є.М.; д.т.н., доцент Сокольський О.Л.; д.т.н., професор Іваненко О. І.

УХВАЛИЛИ:

ПРИЙНЯТИ такий висновок про наукову новизну, теоретичне та практичне значення результатів дисертаційного дослідження:

1. Актуальність теми дослідження

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

2. Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами

Роботу виконано на кафедрі хімічного, полімерного і силікатного машинобудування Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського» відповідно до науково-технічних тематик Міністерства освіти і науки України та наукових планів фундаментальних і прикладних досліджень кафедри ХПСМ у частинах дослідження фізико-механічних властивостей полімерних матеріалів та їх застосування в промисловості: НДР ІХФ–9–2022-2027 «Підвищення енерго- і ресурсозберігаючих показників в технології та обладнанні об'єктів хімічного, полімерного і силікатного машинобудування», 2022–2027 рр., № ДР 0122U201697; автор – виконавець теми.

3. Наукова новизна отриманих результатів полягає у розробці та використанні комплексу новаторських рішень для дослідження і застосування нанокompозиційних матеріалів перед їхнім синтезом шляхом визначення механічних та теплофізичних властивостей потрібних для прогнозування ефективності застосування в наближених до реальних умов експлуатації.

У дисертації вперше одержані такі нові наукові результати:

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 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

нанокомпозиційних матеріалів залежно від температури та об'ємної частки наповнювачів.

4. Теоретичне та практичне значення результатів роботи, впровадження

1. Розроблено комплекс інструментів у вигляді геометричних і числових моделей та скриптів для дослідження фізико-механічних властивостей нанокомпозиційних матеріалів з полімерною матрицею.

2. Розроблено числові моделі для розв'язання задач НДС для визначення ефективних механічних властивостей нанокомпозиційних матеріалів з різним ступенем армування та довільним розміщенням функціоналізованих ВНТ в поліетиленовій матриці. Проведено оцінку достовірності результатів числового моделювання шляхом дослідження сіткової збіжності методом подвійного перерахунку, за результатами якої встановлено, що похибка числового моделювання модуля пружності не перевищує 0,2 %, а коефіцієнта Пуассона – 0,023 %.

3. Виконано верифікацію отриманих даних з фізико-механічних властивостей ПЕ і ПНКМ.

4. Розроблено рекомендації щодо впровадження нанокомпозиційних матеріалів в пакувальну індустрію та промислове виробництво.

5. Результати дисертаційної роботи використовуються в навчальному процесі кафедри хімічного, полімерного і силікатного машинобудування КПІ ім. Ігоря Сікорського під час викладання дисциплін для магістрів спеціальності «131 – Прикладна механіка», що навчаються за ОНП «Прикладна механіка» і ОПП «Інжиніринг пакувань та пакувального обладнання»: «Наукова робота за темою магістерської дисертації», «Механіка суцільних середовищ», «Дослідження та інжиніринг пакувального обладнання». Впровадження результатів дисертаційної роботи в освітній процес забезпечується математичними моделями, методиками теоретичних досліджень фізико-механічних властивостей полімерних матеріалів методами молекулярної динаміки і структурної механіки, розрахунку пакувань та пакувального обладнання, в яких застосовуються полімерні нанокомпозиційні матеріали.

5. Апробація результатів дисертації

Основні положення дисертації доповідалися та обговорювалися на міжнародній конференції InterPartner-2023: The 5th Grabchenko's International Conference on Advanced Manufacturing Processes V (Odesa, 2023) на XII, XIII, XV–XIX всеукраїнських науково-практичних конференціях, що відбувалися на кафедрі ХПСМ КПІ ім. Ігоря Сікорського «Ефективні процеси та обладнання хімічних виробництв та пакувальної техніки» (Київ, 2020–2024), а також на наукових семінарах кафедри ХПСМ КПІ ім. Ігоря Сікорського.

6. Дотримання принципів академічної доброчесності

За результатами науково-технічної експертизи дисертація Чолак І. В. визнана оригінальною роботою, яка не містить елементів фальсифікації, компіляції, фабрикації, плагіату та запозичень.

7. Перелік публікацій за темою дисертації із зазначенням особистого внеску здобувача. *(наводиться повний перелік публікацій за темою дисертації)*

За результатами досліджень опубліковано 16 наукових публікацій, у тому числі:

- 5 статей у наукових фахових виданнях України за спеціальністю 131 «Прикладна механіка»;
- 1 патент України на корисну модель;
- 8 тез виступів на наукових конференціях;
- 2 статті, що додатково відображають результати дисертації.

1. Омельчук (Чолак) І. В., Карвацький А. Я. Застосування молекулярно-динамічного моделювання для визначення фізико-хімічних властивостей полімерних та композитних матеріалів на їхній основі // Вісник Вінницького політехнічного інституту. 2024. № 1. С. 128–137. URL: <https://doi.org/10.31649/1997-9266-2024-172-1-128-137>. *(Здобувачем виконано критичний аналіз сучасного стану проблеми та узагальнено його результати)*

2. Омельчук (Чолак) І.В., Карвацький А.Я.. Визначення фізико-механічних властивостей поліетилену та полімерних нанокомпозитів методами молекулярної динаміки. Вісник Хмельницького національного університету. Серія: Технічні науки. 2024. Т. 335, № 3(1). С. 158–165. URL: <https://doi.org/10.31891/2307-5732-2024-335-3-23>. *(Здобувачем розроблено початкові конфігурації молекулярних систем поліетилену та полімерних нанокомпозитів типу поліетилен-ВНТ, за допомогою молекулярно-динамічного моделювання проведено врівноваження початкових конфігурацій та здійснено продуктивне моделювання їхніх ефективних фізико-механічних властивостей, отримано нелінійні двопараметричні залежності вказаних властивостей залежно від температури та об'ємної частки ВНТ, виконано аналіз отриманих результатів)*

3. Омельчук (Чолак) І.В., Карвацький А.Я. Визначення теплопровідності композиційних матеріалів з поліетиленовою матрицею методами молекулярної динаміки. Збірник наукових праць Національного університету кораблебудування. 2024. № 2 (495). С. 17–26. URL: [https://doi.org/10.15589/znp2024.2\(495\).3](https://doi.org/10.15589/znp2024.2(495).3). *(Здобувачем з використанням молекулярно-динамічного моделювання проведено врівноваження початкових конфігурацій молекулярних систем полімерних нанокомпозитів, виконано числове моделювання їх ефективної теплопровідності, сформульовано висновки)*

4. Чолак І.В. Визначення механічних властивостей полімерних композиційних матеріалів методами структурної механіки. Вісник Хмельницького національного університету. Серія: Технічні науки. 2024. Т.

341, № 5, С. 162–167. URL: <https://doi.org/10.31891/2307-5732-2024-341-5-25>. (Здобувачем у програмному середовищі ANSYS Mechanical APDL розроблено числову скінченно-елементну модель НДС (у вигляді відповідного макросу) зразків нанокомпозитів поліетилен-ВНТ з довільним розташуванням функціоналізованих ВНТ в полімерній матриці та виконано дослідження їхніх ефективних механічних властивостей, проведено порівняння отриманих даних з аналітичними залежностями та результатами молекулярно-динамічного моделювання, сформульовано висновки)

5. Чолак І.В., Карвацький, А.Я. Прогнозування фізичних властивостей нанокомпозитів на основі поліетилену методами молекулярної динаміки. Технічні науки та технології. 2024. № 3 (37), С. 89–100. URL: [https://doi.org/10.25140/2411-5363-2024-3\(37\)-89-100](https://doi.org/10.25140/2411-5363-2024-3(37)-89-100). (Здобувачем за допомогою молекулярно-динамічного моделювання проведено врівноваження початкових конфігурацій молекулярних систем нанокомпозитів типу поліетилен-графен, виконано числове моделювання їхніх ефективних фізико-механічних властивостей, отримано нелінійні двопараметричні залежності вказаних властивостей залежно від температури та об'ємної частки графену, проведено аналіз отриманих даних)

6. Спосіб тривимірного друку виробів: пат. № 147783 У Україна, МПК (2017.01) В29С 64/10 / А.Я. Карвацький, І.О. Мікульонок, С.В. Лелека, В.В. Соловей, І.В. Омельчук (Чолак); заявник і патентовласник – КПІ ім. Ігоря Сікорського. № u202100801; заявл. 22.02.2021; опубл. 09.06.2021, Бюл. № 23/2021. (Здобувачем сформульовано проблему та запропоновано спосіб)

7. Mathematical Modeling of Technological Regulations of Furnace Equipment for Carbon Graphite Electrode Production. Leleka, S., Karvatskii, A., Mikulionok, I., Ivanenko, O., Omelchuk (Cholak), I. Lecture Notes in Mechanical Engineering, 2024, с. 286–295. URL: https://doi.org/10.1007/978-3-031-42778-7_26. (Здобувач прийняв участь у розробленні узагальненої математичної моделі)

8. Омельчук (Чолак) І.В., Карвацький А.Я.. Використання методу Гріна-Кубо для визначення теплопровідності полімерних нанокомпозиційних матеріалів. Ефективні процеси та обладнання хімічних виробництв та пакувальної техніки : збір. доп. XIX Всеукр. наук. прак. конф., 13–14 червн. 2024 р., Київ. Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2024. С. 28–30. URL: <https://cpsm.kpi.ua/conf/materiali-konferentsiji.html>. (Здобувачем з використанням методів молекулярного моделювання на базі методу Гріна-Кубо визначено ефективну теплопровідність молекулярних моделей поліетилену та полімерних композиційних матеріалів з поліетиленовою матрицею і наповнювачами у вигляді вуглецевих нанотрубок та графену за різної частки наповнювачів й температури, сформульовано висновки)

9. Омельчук (Чолак) І.В., Карвацький А.Я.. Числове моделювання фізичних властивостей зразків полімеру та полімерного нанокомпозиту молекулярного масштабу методами молекулярної динаміки. Ефективні процеси та обладнання хімічних виробництв та пакувальної техніки : збір. доп. XVIII Всеукр. наук. прак. конф., 20–21 грудня. 2023 р., Київ. Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2023. С. 8–11. URL: <https://cpsm.kpi.ua/conf/materiali->

[konferentsiji.html](#). (Здобувачем виконано порівняння результатів числового моделювання зразків поліетилену та композиту поліетилен-ВНТ методами молекулярної динаміки з використанням LAMMPS, сформульовано висновки)

10. Омельчук (Чолак) І.В., Карвацький А.Я.. Оцінка фізико-механічних властивостей поліетилену методами молекулярної динаміки. Ефективні процеси та обладнання хімічних виробництв та пакувальної техніки : збір. доп. XVII Всеукр. наук. прак. конф., 14–15 червня. 2023 р., Київ. Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2023. С. 22–25. URL: <https://cpsm.kpi.ua/conf/materiali-konferentsiji.html>. (Здобувачем за допомогою програмного коду LAMMPS виконано молекулярно-динамічне моделювання теплофізичних і механічних властивостей поліетилену з використанням атомістичної моделі та моделі об'єднаного атома, проведено аналіз отриманих даних).

11. Омельчук (Чолак) І.В., Карвацький А.Я.. Використання методів комп'ютерного моделювання для дослідження механічних властивостей поліетилену. Ефективні процеси та обладнання хімічних виробництв та пакувальної техніки : збір. доп. XVI Всеукр. наук. прак. конф., 12–13 грудня. 2022 р., Київ. Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2022. С. 4–5. URL: <https://cpsm.kpi.ua/conf/materiali-konferentsiji.html>. (Здобувачем виконано молекулярно-динамічне моделювання механічних властивостей поліетилену з використанням програмних продуктів Avogadro, Packmol і LAMMPS, сформульовано висновки)

12. Омельчук (Чолак) І.В., Карвацький А.Я.. Використання методів комп'ютерного моделювання для дослідження поведінки полімерів, армувальних компонентів та композитних матеріалів на їх основі. Ефективні процеси та обладнання хімічних виробництв та пакувальної техніки : збір. доп. XV Всеукр. наук. прак. конф., 15–16 червня. 2022 р., Київ. Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2022. С. 34–35. URL: <https://cpsm.kpi.ua/conf/materiali-konferentsiji.html>. (Здобувачем розглянуто підходи до поєднання методів молекулярної динаміки та структурної механіки для багатомасштабних досліджень полімерних систем, отримано температурні залежності модуля пружності та коефіцієнта Пуассона кремнію за допомогою МД моделювання)

13. Омельчук (Чолак) І.В., Соловей В.В. Числова оцінка можливості застосування наномодифікованих полімерів для виготовлення балонів для зберігання скрапленого газу. Ефективні процеси та обладнання хімічних виробництв та пакувальної техніки : збір. доп. XIII Всеукр. наук. прак. конф., 7–8 червня. 2021 р., Київ. Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2021. С. 65–66. URL: <https://cpsm.kpi.ua/conf/materiali-konferentsiji.html>. (Здобувачем проведено числовий аналіз НДС балонів для зберігання та використання скрапленого газу з метою визначення можливості використання наномодифікованих полімерів як матеріал для їх виготовлення, проведено аналіз отриманих даних)

14. Омельчук (Чолак) І.В., Карвацький А.Я.. Визначення густини поліетилену методами молекулярної динаміки з використанням LAMMPS. Ефективні процеси та обладнання хімічних виробництв та пакувальної

техніки : збір. доп. XII Всеукр. наук. прак. конф., 10–11 грудня. 2020 р., Київ. Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2020. С. 27. URL: <https://cpsm.kpi.ua/conf/materiali-konferentsiji.html>. *(Здобувачем побудовано комп'ютерну модель ланцюга молекули поліетилену та визначено його густину методами молекулярної динаміки в програмному середовищі LAMMPS)*

15. Карвацький А. Я., Омельчук (Чолак) І. В., Мікульонок І. О., Витвицький В. М. (2020). Дослідження властивостей полімерів методами молекулярної динаміки з використанням LAMMPS (огляд). Вісник НТУУ “КПІ імені Ігоря Сікорського”. Серія: Хімічна інженерія, екологія та ресурсозбереження, (4), 17–28. URL: <https://doi.org/10.20535/2617-9741.4.2020.219780>. *(Здобувачем на підставі літературного огляду проблеми, виконано критичний аналіз та сформульовано висновки)*

16. Соловей, В. В., Карвацький, А. Я., Лазарєв, Т. В., Мікульонок, І. О., Омельчук (Чолак) І. В. (2021). Визначення механічних властивостей 3д-друкованих полімерних виробів методами структурної механіки. Вісник НТУУ “КПІ імені Ігоря Сікорського”. Серія: Хімічна інженерія, екологія та ресурсозбереження, (2), 16–32. URL: <https://doi.org/10.20535/2617-9741.2.2021.235853>. *(Здобувач прийняв участь у розробленні числових моделей для розв'язання обернених задач НДС для визначення ефективних ортотропних механічних властивостей композитних виробів з різним ступенем армування, аналізі результатів моделювання та формулюванні висновків)*

Якість та кількість публікацій відповідають “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”.

ВВАЖАТИ, що дисертаційна робота Чолак І. В. “Визначення фізичних властивостей полімерних і композиційних матеріалів методами молекулярної динаміки і структурної механіки”, що подана на здобуття ступеня доктора філософії з галузі знань 13 «Механічна інженерія» за спеціальністю 131 «Прикладна механіка» за своїм науковим рівнем, новизною отриманих результатів, теоретичною та практичною цінністю, змістом та оформленням повністю відповідає вимогам, що пред'являють до дисертацій на здобуття ступеня доктора філософії та відповідає напрямку наукового дослідження освітньо-наукової програми КПІ ім. Ігоря Сікорського «Прикладна механіка» зі спеціальності 131 «Прикладна механіка».

РЕКОМЕНДУВАТИ:

1. Дисертаційну роботу “Визначення фізичних властивостей полімерних і композиційних матеріалів методами молекулярної динаміки і структурної механіки”, подану Чолак Іриною Володимирівною на здобуття наукового ступеня доктора філософії, рекомендувати до захисту у разовій спеціалізованій вченій раді.

2. Вченій раді КПІ ім. Ігоря Сікорського утворити разову спеціалізовану вчену раду у складі:

Голова: д.т.н., професор, професор кафедри динаміки і міцності машин та опору матеріалів Навчально-наукового механіко-машинобудівного інституту Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського» **Крищук Микола Георгійович.**

Члени:

Рецензенти:

д.т.н., професор, професор кафедри хімічного, полімерного і силікатного машинобудування Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського» **Гондляр Олександр Володимирович;**

к.т.н., доцент кафедри фізичного матеріалознавства та термічної обробки Інституту матеріалознавства та зварювання ім. Є.О. Патона Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського» **Конорев Сергій Ігорович.**

Офіційні опоненти:

д.т.н., доцент, доцент кафедри хімічних технологій та ресурсозбереження Київського національного університету технологій та дизайну МОН України **Сова Надія Володимирівна;**

к.ф.-м.н., доцент, завідувач кафедри фізики металів Київського національного університету імені Тараса Шевченка **Курилюк Василь Васильович.**

Головуючий на засіданні
д.т.н., доцент,
завідувач кафедри ХПСМ
КПІ ім. Ігоря Сікорського


Олександр СОКОЛЬСЬКИЙ

Вчений секретар
кафедри ХПСМ
к.т.н., доцент


Тетяна ШИЛОВИЧ