Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0825U000961

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 21-03-2025

Статус: Запланована

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Чолак Ірина Володимирівна
2. Iryna V. Cholak

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCHID ID: 0000-0003-4543-4761

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 131

Назва наукової спеціальності: Прикладна механіка

Галузь / галузі знань: механічна інженерія

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Прикладна механіка

Дата захисту:

Спеціальність за освітою: Прикладна механіка

Місце роботи здобувача:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Сектор науки: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): PhD 8105

Повне найменування юридичної особи: Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського"

Код за ЄДРПОУ: 02070921

Місцезнаходження: проспект Берестейський, буд. 37, Київ, 03056, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Сектор науки: Університетський

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського"

Код за ЄДРПОУ: 02070921

Місцезнаходження: проспект Берестейський, буд. 37, Київ, 03056, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Сектор науки: Університетський

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 30.19.59

Тема дисертації:

1. Визначення фізичних властивостей полімерних і композиційних матеріалів методами молекулярної динаміки і структурної механіки

2. Determination of the Physical Properties of Polymer and Composite Materials by Methods of Molecular Dynamics and Structural Mechanics

Реферат:

1. Чолак І. В. Визначення фізичних властивостей полімерних і композиційних матеріалів методами молекулярної динаміки і структурної механіки. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису. Дисертаційну роботу присвячено визначенню 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. 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 нанокомпозиційних матеріалів (ПНКМ) методами молекулярної динаміки (МД), методи побудови молекулярних систем полімерів та композитів їх основі, способи врівноваження молекулярних моделей та подальшого моделювання фізико-механічних властивостей матеріалів. Встановлено, що методи числового моделювання є потужними інструментами для мінімізації витрати матеріальних ресурсів та тривалості розробки нових матеріалів, зокрема нанокомпозитів. Моделювання процесів у полімерах та полімерних нанокомпозитах перед їхнім синтезом за допомогою вказаних методів дає змогу дослідити поведінку матеріалів в наближених до реальних умовах експлуатації та визначити доцільність їхнього виробництва ще на етапі розробки. 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 використовуваних потужностей комп'ютера та розширює часові та просторові границі досліджуваних систем. З використанням програми LAMMPS проведено молекулярно-динамічне моделювання фізико-механічних властивостей поліетилену. Результати верифікації молекулярної моделі поліетилену (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 поліетилен-вуглецеві нанотрубки (ПЕ-ВНТ) і ПЕ-графен методами молекулярної динаміки. Проведено молекулярно-динамічне моделювання теплофізичних властивостей нанокомпозитів ПЕ-ВНТ і ПЕ-графен, що включають: теплопровідність, масову ізобарну теплоємність, коефіцієнт лінійного температурного розширення (КЛТР) та температуру склування. Отримано нелінійні двопараметричні залежності механічних та 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. При цьому для розробки нових нанокомпозиційних матеріалів не потрібно виконувати достатньо складні й тривалі числові експерименти на базі МД моделювання. Вказаний комплекс властивостей потрібен для моделювання термо-пружно-пластичного стану виробів з нанокомпозитів ПЕ-ВНТ і ПЕ-графен в умовах експлуатації в континуальному наближенні. 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. Розроблено інструменти у вигляді математичних моделей, методик теоретичних досліджень фізико-механічних властивостей полімерних матеріалів методами молекулярної динаміки і структурної механіки та розрахунку паковань, в яких застосовуються полімерні нанокомпозиційні матеріали. 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. Результати дисертаційної роботи впроваджено у навчальний процес кафедри хімічного, полімерного і силікатного машинобудування КПІ ім. Ігоря Сікорського під час викладання дисциплін «Дослідження та інжиніринг пакувального обладнання», «Прикладні проблеми механіки суцільних середовищ», «Наукова робота за темою магістерської дисертації» для спеціальності «131 – Прикладна механіка», спеціалізації «Інжиніринг паковань та пакувального обладнання».

2. Cholak I. V. Determination of the Physical Properties of Polymer and Composite Materials by Methods of Molecular Dynamics and Structural Mechanics. – Qualifying scientific work on the rights of the manuscript. The dissertation is devoted to the determination of the physical and mechanical properties of polymer and composite materials using molecular dynamics (MD) methods and structural mechanics before their synthesis, which is necessary for predicting their effectiveness in solving specific tasks under conditions close to real-world operations. An analytical review of the current state of research on the physical and mechanical properties of

polymeric and composite materials was conducted. The software and various force fields used for modeling polymers and polymer nanocomposite materials (PNCMs) by MD methods, the techniques for building molecular systems of polymers and composites, and the ways of equilibrating molecular models for further simulation of the materials' physical and mechanical properties were considered. It was established that numerical modeling methods are powerful tools for minimizing the consumption of material resources and the time required for the development of new materials, particularly nanocomposites. Modeling processes in polymers and polymer nanocomposites before their synthesis using the mentioned methods allows studying the behavior of materials under conditions approximating real operational environments and determining the feasibility of their production at the design stage. The relationship between molecular dynamics and structural mechanics methods was considered through a multiscale approach to enhance modeling capabilities. It was found that the use of a multiscale approach helps to reduce the computational power required and extends the temporal and spatial boundaries of the systems under study. Using the LAMMPS software, MD modeling of the physical and mechanical properties of polyethylene was carried out. The results of verifying the polyethylene (PE) molecular model showed that the MD simulation data either matched or were close to the available literature data. Theoretical studies of the mechanical properties of polyethylene-carbon nanotube (PE-CNT) and PE-graphene nanocomposites were carried out using similar algorithms. Molecular dynamics modeling of the thermophysical properties of PE-CNT and PE-graphene nanocomposites was conducted, including thermal conductivity, specific isobaric heat capacity, the coefficient of linear thermal expansion (CLTE), and the glass transition temperature. Nonlinear two-parameter dependencies of the mechanical and thermophysical properties of PE-CNT and PE-graphene in the temperature range of (280–320) K and the filler volume fractions (0–2.0 %) and (0–1.5 %), respectively, were obtained. For the development of new nanocomposite materials, it is no longer necessary to perform complex and lengthy numerical experiments based on MD modeling. This set of properties is needed for modeling the thermo-elasto-plastic state of PE-CNT and PE-graphene nanocomposite products under operational conditions in a continuum approximation. Mathematical models were formulated, and corresponding numerical models were developed for the stress-strain state tasks for testing PE-CNT nanocomposite materials with functionalized CNT in an isotropic medium approximation. Research was conducted on the effective mechanical properties of PE-CNT nanocomposites with various volume fractions and random placement of functionalized CNTs of different lengths in the polymer matrix. Tools in the form of mathematical models, theoretical research methods for studying the physical and mechanical properties of polymeric materials by molecular dynamics and structural mechanics methods, and calculations for packaging that use polymer nanocomposite materials were developed. Recommendations were made for the use of polymer nanocomposite materials in industrial production and the packaging industry. The efficiency of using PE-CNT nanocomposites instead of PE in water supply pipes and containers for storing chemicals was determined using corresponding comparative stress-strain state calculations. The results of the dissertation were implemented into the educational process of the Department of Chemical, Polymer, and Silicate Engineering at Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute during the teaching of courses such as "Research and Engineering of Packaging Equipment", "Applied Problems of Continuum Mechanics", and "Scientific Work on the Topic of the Master's Thesis" for the specialty "131 – Applied Mechanics", with a focus on "Packaging Engineering and Packaging Equipment".

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Освоєння нових технологій виробництва матеріалів, їх оброблення і з'єднання, створення індустрії наноматеріалів та нанотехнологій

Підсумки дослідження: Теоретичне узагальнення і вирішення важливої наукової проблеми

Публікації:

- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- Спосіб тривимірного друку виробів: пат. № 147783 U Україна, МПК (2017.01) B29C 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
- 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, сторінки 286–295.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.

- 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.
- Соловей, В. В., Карвацький, А. Я., Лазарєв, Т. В., Мікульонок, І. О., & Омельчук (Чолак), І. В. (2021). Визначення механічних властивостей 3d-друкованих полімерних виробів методами структурної механіки. Вісник НТУУ "КПІ імені Ігоря Сікорського". Серія: Хімічна інженерія, екологія та ресурсозбереження, (2), 16–32.

Наукова (науково-технічна) продукція: матеріали; методи, теорії, гіпотези

Соціально-економічна спрямованість: створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Охоронні документи на ОПІВ:

Винаходи, корисні моделі, промислові зразки

Спосіб тривимірного друку виробів: пат. № 147783 U Україна, МПК (2017.01) B29C 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

Впровадження результатів дисертації: Впроваджено

Зв'язок з науковими темами: № ДР 0122U201697

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Карвацький Антон Янович

2. Anton Y. Karvatskyi

Кваліфікація: д.т.н., с.н.с., 05.05.13

Ідентифікатор ORCHID ID: 0000-0003-2421-4700

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського"

Код за ЄДРПОУ: 02070921

Місцезнаходження: проспект Берестейський, буд. 37, Київ, 03056, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Сектор науки: Університетський

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Курилюк Василь Васильович

2. Vasyl V. Kuryliuk

Кваліфікація: к. ф.-м. н., доц., 01.04.07

Ідентифікатор ORCHID ID: 0000-0003-0898-8888

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 60, Київ, 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Сектор науки: Університетський

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Сова Надія Володимирівна

2. Nadiia V. Sova

Кваліфікація: д. т. н., професор, 05.17.06

Ідентифікатор ORCHID ID: 0000-0003-3550-6135

Додаткова інформація: https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56685569600; https://www.webofscience.com/wos/author/record/L-4479-2018; https://scholar.google.com.ua/citations?user=cUevMIQAAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет технологій та дизайну

Код за ЄДРПОУ: 02070890

Місцезнаходження: вул. Мала Шияновська, буд. 2, Київ, 01011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Університетський

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гондлях Олександр Володимирович

2. Oleksandr V. Gondlyah

Кваліфікація: д.т.н., професор, 01.02.04

Ідентифікатор ORCHID ID: 0000-0003-2490-2829

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського"

Код за ЄДРПОУ: 02070921

Місцезнаходження: проспект Берестейський, буд. 37, Київ, 03056, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Сектор науки: Університетський

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Конорев Сергій Ігорович
2. Sergiy I. Konorev

Кваліфікація: к. т. н., доцент, 05.16.01

Ідентифікатор ORCHID ID: 0000-0001-9030-0397

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського"

Код за ЄДРПОУ: 02070921

Місцезнаходження: проспект Берестейський, буд. 37, Київ, 03056, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Сектор науки: Університетський

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Крищук Микола Георгійович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Крищук Микола Георгійович
Відповідальний за підготовку облікових документів	Чолак Ірина Володимирівна
Реєстратор	УкрІНТЕІ

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

Юрченко Тетяна Анатоліївна