

64-72-89/1
01.09.2023р.

ВІДГУК
офіційного опонента
доктора технічних наук, професора
Пукаса Андрія Васильовича

на дисертаційну роботу Сеник Юлії Андріївни на тему «Моделювання та дослідження розмірних ефектів в електропровідних тілах», представлена на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02 – «Математичне моделювання та обчислювальні методи»

Дисертацію Сеник Юлії Андріївни присвячено вирішенню важливої для сучасного виробництва, пов'язаного з використанням наноматеріалів та нанотехнологій, завдання моделювання залежності механічних властивостей нанооб'єктів від їх розмірів.

Тема дисертації є актуальною. Сучасна промисловість широко використовує матеріали, прилади та пристрої, функціонування яких забезпечується елементами їх структури, конструкції, характерні розміри яких вимірюються в нанометрах. При цьому властивості цих елементів, які визначають функціональну надійність, істотно залежать від їх розмірів і не піддаються моделюванню на підставі традиційних уявлень про характеристики деформованого стану матеріалу, напружень, що розвиваються в ньому, їх зв'язки між собою і характерними розмірами твердих тіл, явищ, в яких вони беруть участь.

У даний час з'явився цілий ряд математичних моделей деформівного твердого тіла, які в тій чи іншій мірі адекватно описують розмірні ефекти, що спостерігаються в експериментах. Однак оголошена в них адекватність опису в деяких випадках досягається за рахунок втрати коректності моделей, що будуються, порушення фундаментальних положень механіки деформованого твердого тіла.

Аналіз існуючих математичних моделей, у яких робиться спроба врахування розмірних ефектів, вирішення питання про їх застосування в практичних умовах, у роботі Сеник Ю.А. робиться з погляду, передусім їхньої коректності, що робить його результати актуальними.

Тонкі та товсті плівки і пластини є традиційними об'єктами механіки твердого тіла, що деформується. Їх поведінка під дією зовнішніх впливів глибоко вивчена і продовжує вивчатися. Тому актуальним є побудова таких моделей поведінки плівок, у рамках яких враховано вплив відстаней між кордонами та формою. Дисертація Ю.А. Сеник спрямована на коректне врахування цього впливу.

Крім вказаного, актуальність дисертаційної роботи Сеник Ю.А. підтверджується тим, що вона виконувалась у рамках планових науково-дослідних робіт Центру математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки та математики ім. Я.С. Підстригача НАН України, а саме:

«Розробка математичних моделей та чисельно-аналітичних методів розв'язування сучасних задач фізико-технічних і медико-біологічних наук та інформаційних технологій» (номер держреєстрації 0111U009748, 2012-2016 pp.) і «Розробка та дослідження сучасних математичних моделей у галузі фізико-технічних та медико-біологічних наук» (номер держреєстрації 0117U004156, 2017-2021 pp.).

Мета дисертаційної роботи Ю. А. Сеник полягає у математичному моделюванні механічних та фізичних процесів у пружному тілі, що враховують структурну неоднорідність матеріалу та геометричну неоднорідність реальної поверхні тіла, в рамках якої можливе відображення аномальних, стосовно класичного опису, розмірних ефектів, що проявляються для їх товщин.

Для досягнення мети авторка дисертації вирішила ряд завдань, суть яких відображена в назвах розділів, представлених у змісті роботи.

У дисертації використано теоретичні методи дослідження. Для перевірки результатів, отриманих теоретичними методами, використані дані з розглянутих в роботі інформаційних джерел. Проте Ю.А. Сеник приділяє велику увагу питанням коректності обробки наявних у літературі даних,

відповідності умов їх отримання гіпотезам, на підставі яких отримано теоретичні результати.

Обсяг та структура дисертаційної роботи. Дисертаційна робота складається з вступу, чотирьох розділів, висновків та списку використаної літератури. Обсяг роботи – 151 сторінка, з них 28 займає список використаних джерел, який включає 280 найменувань і з них більше ста є англомовні. Остання обставина свідчить про те, що у роботі над дисертацією враховано світовий досвід у напрямі проведених досліджень.

Стислий аналіз роботи.

У **вступі** проведено обґрунтування актуальності теми дисертації, аргументовано зв'язок роботи з науковими програмами, які проведено в Інституті прикладних проблем механіки та математики ім. Я.С.Підстригача НАН України, проведено огляд досліджень, а також перераховані пункти наукової новизни та практичної значущості результатів роботи, їх достовірності, яким чином вони апробовані та де знайшли застосування, які положення дисертації її автор передбачає захищати.

У першому розділі дисертації Аналіз відомих підходів до математичного моделювання сучасних конструкційних матеріалів запропоновано огляд наукової літератури за темою дисертації в області математичного моделювання напружено-деформованого стану структурно неоднорідного електропровідного неферомагнітного твердого тіла. Також проведено огляд літератури, що пропонує дослідження впливу врахування геометричної неоднорідності матеріалу тіла на математичну модель. При цьому особливо увагу привернуто до досліджень розподілу густини, термодинамічного електричного потенціалу, величини заряду та напружень, вивченю впливів розмірних ефектів на зони міцності з врахуванням залежності модулів пружності від густини. Окремо запропоновано огляд відомих підходів до моделювання напружено-деформованого стану структурно неоднорідних тіл.

У розділі наголошено, що при моделюванні процесів, що характерні для електропровідних неферомагнітних тіл з метою підвищення точності отриманих результатів необхідно враховувати структуру матеріалу та неоднорідність приповерхневої густини у стаціонарному стані електропровідного неферомагнітного термопружного твердого тіла. При цьому важливо аналізувати також джерела маси для коректного врахування «приповерхневого дефекту маси», властивого відомим моделям, які побудовані за локально градієнтним підходом у термомеханіці.

У другому розділі дисертації Математичні моделі термодинаміки нерівноважних процесів продемонстровано виведення основних співвідношень термодинаміки для локально неоднорідного твердого тіла. При цьому за ключові функції вибрано компоненти тензора напружень і густину матеріалу тіла. Записано крайові умови, які враховують властивості поверхонь досліджуваних твердих тіл. На основі представлених співвідношень сформована математична модель, що описує напруженодеформований стан з врахуванням геометричної неоднорідності поверхні, а також залежності локальних модуля Юнга та коефіцієнта Пуассона від густини матеріалу тіла.

При виведені балансових співвідношень розглянуто деформівне електропровідне неферомагнітне тверде тіло, у якому визначальними немеханічними процесами є процеси: теплопровідності та перерозподілу електричної системи (електропровідності). Для опису деформаційних процесів використано методи нелінійної механіки, які враховують залежність пружних характеристик матеріалу тіла від таких параметрів, як температура та густина і застосовано гіпотезу локального рівноважного стану. Аналіз визначальних співвідношень для термодинамічного електричного потенціалу демонструє, що його визначення у зв'язаній постановці необхідне для визначення напруженено-деформованого стану тіла.

Таким чином в другому розділі з використанням методів термодинаміки нерівноважних процесів записані основні співвідношення для побудови математичних моделей та кількісного вивчення взаємозв'язаних фізико-механічних процесів у деформівних твердих тілах із врахуванням структурної неоднорідності (енергії зв'язку) та приповерхневої неоднорідності і процесу зміни структури матеріалу тіла.

У третьому розділі дисертації *Нелінійна математична модель приповерхневої неоднорідності у гетерогенному півпросторі* у рамках моделі локально неоднорідного електропровідного твердого тіла проведено аналіз закономірностей приповерхневої неоднорідності у гетерогенному півпросторі. Розглянуто електропровідний неферомагнітний півпростір, віднесений до прямокутної декартової системи координат. Вважається, що півпростір вільний від силового навантаження, а на його поверхні задано відмінне від відлікового значення густини.

У результаті проведених досліджень продемонстровано, що у приповерхневій області тіла електричний заряд змінює знак, тобто у цій області існує подвійний електричний шар, який є наслідком врахування в рамках моделі сил кулонівської взаємодії, структурної неоднорідності матеріалу та шорсткості реальної поверхні півпростору. При цьому враховано залежність пружних властивостей від характеру неоднорідності і відображені їх шляхом врахування залежності модуля Юнга та коефіцієнта Пуассона від густини у точці тіла, яка сформульована у вигляді співвідношення (3.3). Такого вигляду залежність пружних властивостей неоднорідного тіла від густини, згідно вказаних в роботі інформаційних джерел, є характерною для пористих середовищ.

На основі запропонованої математичної моделі проведено числові дослідження розподілу густини у півпросторі, розподілу електричного потенціалу та заряду, а також розподілу напружень у півпросторі. Продемонстровано, що врахування електронної підсистеми тіла приводить до

зміни значень механічних полів в усій області твердого тіла та характеру їх розподілу особливо у вузькій приповерхневій області.

У четвертому розділі дисертації *Моделювання розмірних ефектів модулів пружності локально неоднорідних електропровідних тіл* досліджено закономірності приповерхневої неоднорідності у безмежному гетерогенному шарі. Розглянуто електропровідний неферомагнітний, вільний від силового навантаження, віднесений до прямокутної декартової системи координат, шар, на поверхні якого задано відмінне від відлікового значення густини. Як і в півпросторі, у шарі вільному від силового навантаження існує ненульовий напружено-деформований стан спричинений врахуванням в рамках моделі гетерогенності матеріалу, геометричної неоднорідності реальної поверхні тіла та сил кулонівської взаємодії.

У розділі представлено математичну модель стану деформівного твердого шару із залежними модулями пружності. Прийнято суттєву залежність пружних властивостей від неоднорідності матеріалу тіла і відображене це шляхом врахування степеневої залежності модуля Юнга та коефіцієнта Пуассона від відносної зміни густини у точці тіла.

Сформульована при побудові моделі система рівнянь описує зв'язані поля в електропровідному неферомагнітному гетерогенному твердому шарі з врахуванням геометричної неоднорідності реальної поверхні тіла. Це можна розглядати як методику розв'язування сформульованого типу краївих задач, що описують рівноважний стан.

Наведена математична модель демонструє, що для напружено-деформованого стану та виникаючих розмірних ефектів міцності, що характерно для тонких плівок, властиві три характерні розміри, що пов'язані з гетерогенністю матеріалу, геометричною неоднорідністю реальної поверхні тіла та силами кулонівської взаємодії.

На основі побудованої математичної моделі проведено числові дослідження розподілу густини у шарі, розподілу електричного потенціалу та

заряду у шарі, а також розподілу напружень у шарі. Розглянуто особливості моделювання розмірного ефекту міцності шару та розмірного ефекту ефективних модулів пружності. Продемонстровано, що врахування електронної підсистеми тіла приводить до зміни значень механічних полів у всій області твердого тіла та характеру їх розподілу у вузькій приповерхневій області.

Ступінь обґрунтованості та достовірності наукових положень і висновків дисертації.

Достовірність представлених результатів забезпечується строгими теоретичними викладками при побудові математичних моделей, що базуються на основних положеннях термодинаміки нерівноважних процесів і механіки суцільного середовища, математичною строгостю та коректністю постановки розв'язаних у роботі задач, використанням апробованих підходів та методів математичної фізики, а також узгодженням окремих результатів з відомими у літературі даними. Опрацювання та аналіз отриманих результатів здійснено з використанням сучасних програмних засобів та теоретичних підходів. Все вище згадане забезпечує обґрунтованість та достовірність отриманих результатів, а також сформульованих на їх основі висновків дисертації.

Основні результати дисертації опубліковані у періодичних виданнях, індексованих міжнародною наукометричною базою даних Scopus, а також у періодичних виданнях, які входять до Переліку наукових фахових видань України. Апробація роботи проходила на профільних міжнародних та вітчизняних наукових конференціях за безпосередньої участі автора. Публікації автора у наукових журналах та матеріалах конференцій відображають суть виконаних досліджень та представлених в дисертації результатів.

Автореферат дисертації адекватно передає основні наукові результати дисертантки і повністю відповідає її змісту.

Зауваження щодо дисертаційної роботи

1. У вступі сформульована мета дисертації. Однак не приведено чіткого формулювання завдань, під час вирішення яких мета дисертаційної роботи досягається.

2. У першому розділі доцільно було б чітко відділити огляд робіт, що описують проблеми математичного моделювання розмірних або масштабних ефектів від інших представлених в огляді літературних та інформаційних джерел.

3. Роблячи огляд робіт, які стосуються проблеми моделювання неоднорідностей приповерхневої зони і проводячи власні дослідження у цьому напрямі, було б доречно згадати результати Л.Д. Ландау та Є.М. Ліфшиця щодо побудови термодинаміки поверхні.

4. Доречні більш детальні, ніж це представлено в дисертації, описи та аналіз перевизначеності системи рівнянь при переході від другого до третього та четвертого розділів роботи.

5. У третьому та четвертому розділах, на відміну від представлених в огляді літературних джерел, за визначальну функцію обрано термодинамічний електричний потенціал ϕ . Вважаю, що на таку особливість дисертаційної роботи необхідно більше звернути увагу в процесі побудови розв'язку відповідних краївих задач.

6. В роботі, а саме в третьому та четвертому розділах, при візуалізації результатів чисельних досліджень, отриманих на основі побудованих математичних моделей, для деяких графіків не достатньо чітко представлені всі характеристики, за яких проведені обчислення.

7. У роботі зустрічаються незначні граматичні та стилістичні огріхи, наприклад, в другому, третьому і четвертому розділах обґруntовується врахування залежностей модуля Юнга та коефіцієнта Пуассона від густини, хоча достатньо було б одного разу.

8. У висновках доцільно було б відобразити підвищення ефективності розв'язуваних задач із використанням нових наукових результатів, отриманих у дисертаційній роботі.

Перераховані зауваження мають рекомендаційний характер, не ставлять під сумнів результати дисертації та не впливають на її оцінку.

Виходячи з вищезазначеного, вважаю, що представлена дисертація «Моделювання та дослідження розмірних ефектів в електропровідних тілах» є завершеною науково-дослідницькою роботою, яку виконано на високому науковому рівні із застосуванням сучасних методів моделювання і повністю відповідає вимогам МОН України, які висуваються до робіт на здобуття наукового ступеня кандидата наук, а її автор, Сеник Юлія Андріївна, заслуговує присудження наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02 - математичне моделювання та обчислювальні методи.

Офіційний опонент,
доктор технічних наук, професор,
завідувач кафедри комп'ютерних
наук Західноукраїнського
національного університету

Андрій ПУКАС

