

ВІДГУК
офіційного опонента

на дисертаційну роботу Сенік Юлії Андріївни на тему “Моделювання та дослідження розмірних ефектів в електропровідних тілах”, представлену на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02 – “Математичне моделювання та обчислювальні методи”

Актуальність теми дисертаційної роботи

Роль поверхневих явищ у природних та технологічних процесах надзвичайно велика, та їхнє використання у виробничій діяльності дозволяє інтенсифікувати існуючі технологічні процеси. Поверхневі явища здебільшого визначають шляхи отримання та довговічність найважливіших будівельних та конструкційних матеріалів; ефективність видобутку та збагачення корисних копалин; якість та властивості продукції, що випускається хімічною, текстильною, харчовою, хіміко-фармацевтичною та багатьма іншими галузями промисловості. Велике значення мають поверхневі явища у металургії, виробництві кераміки, металокераміки, полімерних матеріалів.

Безперервне зменшення характерних розмірів електронних та мікромеханічних компонентів, гібридних мікро-наноелектромеханічних систем, пліткових покриттів та інших продуктів нанотехнологій зробило актуальним розробку адекватних засобів дослідження їхніх фізико-механічних властивостей у наношкالی.

Аналіз сучасного рівня досліджень в області механіки дрібнодисперсних композитів та середовищ з мікро- та наноструктурою показує, що потреба у послідовних моделях механіки, які здатні описати масштабні ефекти, є своєчасною та актуальною. Є досить велика кількість експериментальних фактів, які фіксують існування масштабних ефектів у суцільних середовищах. При цьому, незважаючи на значні зусилля, можна стверджувати, що фактично відсутня послідовна континуальна теорія механіки деформованих середовищ з масштабними ефектами, яка б дозволила встановити загальні закономірності внутрішніх взаємодій на неоднорідностях субатомного рівня, пов'язаних з мікро- та наноструктурами. Класична механіка суцільного середовища не може в принципі описати масштабні ефекти. Ця ситуація обмежує можливості моделювання аномальних властивостей нових матеріалів з внутрішніми структурами (нанокомпозитів, наноустроїв, тонких плівок і т.д.). Розвиток технології виробництва нанооб'єктів та наноустроїв вимагає створення теорії, здатної описати як властивості існуючих нанооб'єктів і структур, так і властивості проєктованих. Як правило, нанооб'єкти використовуються не самі, а в композиції з макрооб'єктами. Тому важливу роль відіграє технологія створення їх композицій та вміння її моделювати. Знання механізмів та вміння керувати такими явищами, як змочуваність, капілярність, адгезія, також має велике значення при розробці тих самих композиційних матеріалів.

9108-27-10
05.04.80.10

Метою представленої дисертаційної роботи є математичне моделювання механічних та фізичних процесів у пружному тілі, які враховують структурну неоднорідність матеріалу та геометричну неоднорідність реальної поверхні тіла.

Наукова новизна одержаних результатів полягає у такому:

- вперше сформовано математичну модель для опису стаціонарного стану електропровідного неферромагнітного твердого тіла, яка враховує структуру матеріалу та неоднорідність приповерхневої густини;
- виходячи з нелінійної постановки задачі, проаналізовано розподіли густини, термодинамічного електричного потенціалу, заряду та напружень з урахуванням степеневі залежності пружних властивостей матеріалу від густини;
- проведено дослідження впливу модулів пружності на розмірний ефект межі міцності шару і визначено, що врахування електронної підсистеми призводить до зміни отриманих розподілів механічних полів в усій області тіла та характеру їхніх значень у вузькій приповерхневій області;
- обґрунтовано важливість урахування залежності модулів пружності від густини з точки зору опису поведінки наноелементів, а також показано, що густина та модулі пружності є рівнозначними характеристиками тіла;
- продемонстровано, що в рамках моделі, яка враховує степеневі залежності локальних модулів пружності від густини, розмірні ефекти модулів пружності відрізняються від результатів, отриманих при лінійній постановці задачі.

Загалом, дисертаційна робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків та списку використаних джерел (280 позицій); її обсяг становить 151 сторінку. У кінці роботи подано додатки з актами використання результатів роботи, що не увійшли до основного тексту дисертації. Така структура є логічною та цілком відображає зміст викладеного матеріалу.

У вступі автор обґрунтовує актуальність теми дослідження, формулює його мету і задачі, підкреслює наукову новизну та практичне значення отриманих результатів. Зокрема актуальність аргументується попитом на сучасні функціональні мікро- та нанотехнології, з одного боку, та складністю їхнього опису, з іншого.

У першому розділі подано огляд літератури, в якому спочатку є контекст дослідження та аналіз відомих підходів у області математичного моделювання електропровідних неферромагнітних тіл. Далі розглянуті методика, що описують приповерхневі неоднорідності при побудові моделей в механіці деформівного твердого тіла зі застосуванням нелокальних, гібридних та градієнтних підходів у теорії пружності. Особливо відзначено, що вплив масштабних чинників, нелокальних ефектів та розміро-залежність механічних явищ, наприклад, при деформуванні тонких плівок, нанодротів, нанотрубок та композитів з мікронановключеннями не може бути пояснена в рамках класичної механіки суцільних середовищ. Для опису таких ефектів та

пов'язаних з ними особливостей процесів деформування можуть використовуватися прямі дискретно-атомістичні методи дослідження, методи молекулярної динаміки, чисельні квантово-механічні методи.

У цьому розділі відзначено, що останнім часом актуальність дослідження закономірностей зміни фізичних властивостей речовини під час переходу до плівкового стану істотно зросла. Це пов'язано з роботами зі створення активних матеріалів та пристроїв на основі наноструктур. Запропоновано досить широкий аналіз відомих підходів до математичного моделювання різноманітних ефектів в електропровідних неферомагнітних тілах, який підтвердив, що залишається актуальною науковою задачею створення адекватних математичних моделей, які коректно, з урахуванням мікроструктури матеріалу і з достатньою точністю, описують приповерхневі та контактні явища, зокрема розмірні ефекти. Такі моделі повинні враховувати структуру матеріалу та неоднорідність приповерхневої густини у стаціонарному стані електропровідного неферомагнітного термопружного твердого тіла.

Другий розділ є першим оригінальним, в якому на основі відомих з літературних джерел теоретичних досліджень виведено основні співвідношення термодинаміки локально неоднорідного твердого тіла. При цьому застосовані базові співвідношення термодинаміки нерівноважних процесів та прийнято, що довільний, малий порівняно з розміром тіла, його елемент розглядається як відкрита термодинамічна система, густина якої завдяки потоку маси є змінною величиною.

Згідно формулювань задач механіки деформівного твердого тіла за основу вибрано такі функції: вектор переміщення (тензор напружень) і вектор збурення маси. Згідно до властивостей поверхонь досліджуваних твердих тіл записані крайові умови. На основі такого представлення побудовано математичну модель, що описує напружено-деформований стан з урахуванням геометричної неоднорідності поверхні, а також залежності локальних модулів Юнга та коефіцієнта Пуассона від густини матеріалу тіла. Також в ході аналітичних викладок показано, що за вибраних крайових умов система рівнянь, записана відносно вектора переміщення (тензора напружень) і вектора збурення маси, є оптимальною.

З урахуванням того, що пружні коефіцієнти матеріалу досліджуваного твердого тіла є залежними від густини, записано повну нелінійну систему рівнянь моделі для електропровідного термопружного тіла та подано її лінеаризацію, якщо знехтувати нелінійними доданками, пов'язаними із електромагнітним полем та термодинамічними силами.

У третьому розділі на основі виведених попередньо основних співвідношень термодинаміки локально неоднорідного твердого тіла побудовано математичну модель нелінійної приповерхневої неоднорідності у гетерогенному півпросторі. У рамках моделі локально неоднорідного електропровідного твердого тіла згідно записаної крайової задачі проведено визначення розподілу густини матеріалу, термодинамічного електричного потенціалу та компонент тензора напружень для півпростору. Згідно

оглянутих літературних джерел та прийнятих умов півпростором можна моделювати такі характерні елементи, як товсті плівки.

На основі представлених аналітичних викладок проведено чисельні дослідження перелічених визначальних функцій та запропоновано низку цікавих висновків після аналізу отриманих результатів.

Четвертий розділ присвячено дослідженням закономірностей приповерхневої неоднорідності у безмежному гетерогенному шарі на основі виведених в другому розділі базових співвідношень локально неоднорідного електропровідного твердого тіла. Побудовано якісно нову математичну модель стану гетерогенного електропровідного деформівного твердого шару із залежними локальними модулями пружності. Особливість і новизна такої математичної моделі полягає в тому, що вона враховує суттєву залежність пружних властивостей від неоднорідності матеріалу тіла, яке полягає у врахуванні залежності модуля Юнга та коефіцієнта Пуассона від відносної зміни густини у точці тіла.

На основі отриманих аналітичним шляхом розв'язків проведено числові дослідження та аналіз результатів розподілу густини у шарі, розподілу електричного потенціалу та заряду у шарі, а також розподілу напружень у шарі. В цьому розділі також привернуто увагу до особливостей моделювання розмірного ефекту міцності шару та розмірного ефекту ефективних модулів пружності матеріалу тіла.

Основні результати роботи подані у загальних **висновках**, які є логічними і адекватно виражають отримані наукові результати.

Результати роботи опубліковано у шести статтях у наукових журналах, три з яких індексуються наукометричною базою Scopus, а також у тринадцяти тезах доповідей та матеріалах конференцій, більшість з яких є міжнародними.

ЗАУВАЖЕННЯ

1. Виклад матеріалу ведеться від першої особи множини ("ми", "нами" тощо). З огляду на те, що автором дисертаційної роботи є здобувач Сенік Ю. А., варто викладати матеріал від першої особи однини або безособово ("отримано", "розв'язано" тощо).

2. В першому і другому розділах роботи декілька разів наголошувалось, що досліджуване тіло є неферромагнітне. В розділах 3 та 4, при переході від базових формул з другого розділу до побудови конкретних математичних моделей цю властивість тіла варто було б також зазначити.

3. В параграфі 5 четвертого розділу проведено порівняння отриманих результатів для безрозмірних величин з аналогічними для конкретного матеріалу, а саме титану. Варто було б провести подібні дослідження для більш широкого діапазону матеріалів (і не лише металів).

4. В дисертації є деякі термінологічні хиби, а саме вживається "розтягнення" замість "розтяг" (с.32), "міцністю на розрив" замість "міцністю на розтяг" (с.34). Також в роботі є мовні огріхи та русизми. Зокрема, вжито слова та словосполучення "в залежності" замість "залежно" (с.3), "фактори" замість "чинники" (с.4,27,32), "що викликані" замість "які спричинені"

(с.4,36), “границь міцності” замість “меж міцності” (с.19,35), “наведено” замість “подано” (с.25,38,50,75,84,92), “включають” замість “містять” (с.27), “шорохуватості” замість “шорсткості” (с.29), “в порівнянні” замість “порівняно” (с.29,35), “посвячені” замість “присвячені” (с.35), “приймаємо” замість “беремо” (с.46,49,82), “у відповідності” замість “відповідно” (с.49), “незатухаючої” замість “незгасаючої” (с.50), “в силу умови” замість “за умови” (с.91), “у цілому” замість “загалом” (с.96,111), “в більшій мірі” замість “здебільшого” (с.110).

Зроблені зауваження жодним чином не заперечують позитивного враження від змісту поданої до захисту роботи як глибокого та цілісного наукового дослідження. Сформульована мета дисертації була повністю досягнута. За своїм науковим рівнем, актуальністю і новизною отриманих результатів дисертаційна робота Ю. А. Сенік є комплексною та завершеною кваліфікаційною науковою працею, в якій успішно вирішена важлива науково-технічна задача. Результати, отримані у дисертаційній праці, є новими, достовірними та добре обґрунтованими. Вважаю, що дисертаційна робота задовольняє усім вимогам, які ставить АК МОН України до кандидатських дисертацій, а її автор Ю. А. Сенік цілком заслуговує надання їй наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02 - математичне моделювання та обчислювальні методи.

Кандидат фізико-математичних наук,
доцент, заступника декана механіко-
математичного факультету з наукової
і навчально-виховної роботи
Львівського національного
університету імені Івана Франка

І.С.Кузь

Підпис І. С. Кузя засвідчую:

Вчений секретар
Львівського національного університету
імені Івана Франка



О. С. Грабовецька