

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.190.06 НА БАЗЕ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО
УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ПЕТРОЗАВОДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ» ПО ДИССЕРТАЦИИ
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 20.11.2015 г., протокол № 19

о присуждении **Сидоровой Ольге Владимировне** гражданке Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация *«Структурное состояние Ca-Si содержащих минералов, механоактивированных на воздухе и в атмосфере CO₂»* в виде рукописи по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Петрозаводский государственный университет» на кафедре физики твердого тела физико-технического факультета.

Диссертация принята к защите « 18 » сентября 2015 года № протокола 14.

Соискатель Сидорова Ольга Владимировна, 1988 года рождения, гражданка Российской Федерации, на момент защиты работает на кафедре физики твердого тела физико-технического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Петрозаводский государственный университет» в должности инженера 2 категории. В 2011 году соискатель окончила магистратуру Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Петрозаводский государственный университет» по направлению «Физика» с присвоением дополнительной квалификации «Преподаватель высшей школы». В 2014 году окончила очную аспирантуру Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Петрозаводский государственный университет» по направлению 01.04.07 физика конденсированного состояния.

Диссертация выполнена на кафедре физики твердого тела физико-технического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения

высшего профессионального образования «Петрозаводский государственный университет».

Научный руководитель – кандидат физико-математических наук, доцент **Алешина Людмила Александровна** работает в должности доцента кафедры физики твердого тела физико-технического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Петрозаводский государственный университет».

Официальные оппоненты:

1. **Цыбуля Сергей Васильевич**, гражданин Российской Федерации, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией структурных методов исследования Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук,
2. **Теплякова Наталья Александровна**, гражданка Российской Федерации, кандидат физико-математических наук, исполняющий обязанности старшего научного сотрудника Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И. В. Тананаева Кольского научного центра Российской академии наук дали **положительные** отзывы о диссертации.

Ведущая организация **Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» (МГУ имени М.В. Ломоносова)**, г. Москва, в своем **положительном** заключении, подписанном заведующим кафедрой физики твердого тела физического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, доктором физико-математических наук, профессором *Илюшиным Александром Сергеевичем* и доцентом кафедры физики твердого тела физического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, кандидатом физико-математических наук, *Авдюхиной Валентиной Михайловной* и утверждённым проректором МГУ имени М.В. Ломоносова, доктором физико-математических наук, профессором *Федяниным Андреем Анатольевичем*, указала, что «полностью удовлетворяет требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842),

предъявляемым к кандидатским диссертациям». Отзыв о диссертационной работе Сидоровой О.В. рассмотрен и одобрен на заседании Ученого совета Отделения физики твердого тела физического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова от 19 октября 2015 г., протокол № 4.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. **Еремина Николая Николаевича**, доцента, доктора химических наук, профессора кафедры кристаллографии и кристаллохимии геологического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

Замечания:

- 1) Не совсем понятно, что автор вкладывает в понятие «компьютерного моделирования структурного состояния» (цель работы). Если это относится к задаче номер 3 автореферата «построение моделей строения областей ближнего упорядочения...методом молекулярной динамики», то формулировка цели слишком обширная, так как задача поставлена значительно более частная.
- 2) Описание пятого раздела второй главы диссертации (стр. 9) следовало бы дать, намного более развернуто. Диссертант не дает никакой информации о том, как осуществлялись МД расчеты: отсутствуют данные по модели потенциалов, в автореферате нет никакой информации, насколько используемая модель результативна применительно к воспроизводству кристаллических структур изучаемых соединений, их физических и термодинамических характеристик. Результаты расчетов скрыты от читателя, их невозможно воспроизвести. Это ставит под сомнение выводы работы, касающиеся молекулярно-динамических расчетов.
- 3) С точки зрения рецензента название диссертационной работы просто неудачное: титанат стронция SrTiO_3 , рассматриваемый в работе, не относится ни к Са-содержащим минералам, ни к Si-содержащим минералам. Также отметим, что в последнее время рекомендуется в названиях диссертационных работ не использовать сокращения и химические формулы.

2. **Демакова Юрия Павловича**, профессора, кандидата физико-математических наук, профессора кафедры «Радиотехника» приборостроительного факультета

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Ижевский государственный технический университет имени М.Т. Калашникова».

Замечание: Из автореферата неясна методика расчетов погрешностей полученных результатов.

3. Крылова Петра Николаевича, доцента, кандидата физико-математических наук, заведующего кафедрой физики твердого тела Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Удмуртский государственный университет».

Замечание: из автореферата непонятно, какие пространственные группы симметрии имеют низкотемпературная и высокотемпературная фазы сфена (таблица 2).

4. Детчуева Юрия Алексеевича, кандидата физико-математических наук, директора ООО «АлДаймондСаха» (Владимирская обл., г. Александров).

Все отзывы, поступившие на диссертацию и автореферат, **положительные** (из них 3 отзыва с замечаниями, указанными выше) и заканчиваются выводом, что диссертационная работа Сидоровой О.В. полностью соответствует требованиям, которые ВАК предъявляет к кандидатским диссертациям, а её автор – Сидорова О.В. – заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается компетентностью оппонентов в области физики конденсированного состояния, значимым вкладом ведущей организации в области изучения структуры и свойств реальных кристаллов и аморфных веществ с особыми свойствами по рентгенографическим данным, а также в области разработки методов рентген-дифракционного анализа (в том числе, новых методов структурного анализа в кинематическом приближении), что подтверждается публикациями за последние пять лет оппонентов и учёных из ведущей организации в высокорейтинговых научных журналах в области физики конденсированного состояния.

Соискатель имеет 12 опубликованных работ, из них по теме диссертации опубликовано 12 научных работ общим объёмом 4,5 печатных листов, в том числе 2 статьи в научных журналах и изданиях, которые включены в перечень российских

рецензируемых научных журналов и изданий для опубликования основных научных результатов диссертаций; 8 работ опубликованы в материалах всероссийских и международных конференций и симпозиумов; имеется 1 публикация в электронном научном издании; 1 отчет о НИР, зарегистрированный в ЦИТИС.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Сидорова О.В., Алешина Л.А., Калинин А.М Влияние механоактивации на структурное состояние титаната стронция // Фундаментальные исследования. – 2014. – № 12–2. – С. 280-288.
2. Сидорова О.В., Алешина Л.А., Калинин А.М., Калинкина Е.В. Ближний порядок в механоактивированных титанитах // Ученые записки Петрозаводского государственного университета. Сер. "Естественные и технические науки". – 2012. – № 4 (125). – С. 112-116.
3. Алешина Л.А., Сидорова О.В., Осауленко Р.Н., Фофанов А.Д., Калинин А.М Рентгенографические исследования влияния размола на структурные характеристики образцов псевдоволластонита // Электронный журнал "Исследовано в России". – 2009. – 030. – С. 297-306. Режим доступа: <http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2009/030.pdf>

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

получены новые экспериментальные данные об изменении структурного состояния псевдоволластонита CaSiO_3 , титанита (сфена) CaTiSiO_5 , диопсида $\text{CaMgSi}_2\text{O}_6$ и титаната стронция SrTiO_3 в кристаллическом состоянии, а также после механоактивации в среде воздуха и углекислого газа.

предложена модель, описывающая строение областей ближнего упорядочения Ca-Si содержащих материалов, в виде смеси хаотически разориентированных кластеров, размеры, количество и степень идеальности которых зависят от условий и времени размола.

доказана эффективность использования методов рентгеноструктурного анализа (в частности, метода Уоррена-Финбака в сочетании с методами компьютерного моделирования) для исследования ближнего порядка Ca-Si содержащих материалов, находящихся в некристаллическом состоянии.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказано, что сочетание метода Финбака-Уоррена с построением моделей областей ближнего упорядочения методом Дебая с внесением в них беспорядка методом молекулярной динамики, позволяет получить пространственные конфигурации атомов для аморфных объектов;

изложены и корректно обоснованы особенности применения методов рентгеноструктурного анализа в сочетании с методами Дебая и молекулярной динамики при исследованиях Ca-Si содержащих материалов в некристаллическом состоянии;

раскрыт характер влияния условий механоактивации на характеристики ближнего порядка Ca-Si содержащих минералов;

изучено влияние атмосферы воздуха и CO₂ и времени механоактивации на атомную структуру псевдоволластонита CaSiO₃, титанита (сфена) CaTiSiO₅, диопсида CaMgSi₂O₆ и титаната стронция SrTiO₃ и обнаружено, что наиболее быстро до наноразмерного состояния размалывается псевдоволластонит, относящийся к классу кольцевых силикатов, а наиболее медленно – диопсид, относящийся к классу цепочечных силикатов; установлено, что во всех трех Ca-Si содержащих минералах размол в атмосфере углекислого газа протекает медленнее, чем в воздухе;

проведена апробация методики анализа взаимного расположения координационных многогранников в моделях строения многокомпонентных некристаллических объектов.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

определены возможности практического использования метода Уоррена-Финбака к анализу структуры механоактивированных многокомпонентных Ca-Si содержащих материалов;

разработаны рекомендации по расчету характеристик ближнего порядка и построению моделей областей ближнего упорядочения Ca-Si содержащих материалов, находящихся в некристаллическом состоянии;

представлены и обоснованы пути дальнейшего развития методов анализа дифракционных картин Ca-Si содержащих материалов.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

результаты получены на сертифицированном оборудовании, в работе использованы современные методы получения и обработки данных рентгенодифракционного эксперимента и методики компьютерного моделирования для создания моделей атомной структуры исследуемых систем;

идея анализа структурного состояния объектов исследования базируется на сопоставлении результатов компьютерных расчетов и экспериментальных данных;

использовано сравнение результатов исследований, полученных автором, с экспериментальными данными ряда работ по рассматриваемой тематике; результаты экспериментов и расчетов воспроизводимы и не противоречат литературным данным по тематике исследования;

установлено качественное совпадение авторских результатов с результатами, представленными в независимых источниках по данной тематике для Ca-Si содержащих материалов.

Таким образом, представленные в диссертационной работе результаты и выводы достоверны и обоснованы.

Личный вклад соискателя состоит в:

активном участии в исследовании на всех этапах процесса: планировании и проведении рентгенографических экспериментов, в выполненной лично автором обработке и интерпретации полученных экспериментальных данных, в разработке моделей атомной структуры для описания результатов дифракционных экспериментов и некоторых методических аспектов, связанных с анализом структуры Ca-Si содержащих материалов, в подготовке публикаций по теме выполненной работы.

Диссертация охватывает основные вопросы поставленной научной задачи и соответствует критерию внутреннего единства, что подтверждается наличием последовательного плана исследований, непротиворечивостью результатов и взаимосвязанностью выводов.

Диссертационный совет Д 212.190.06 на заседании 20 ноября 2015 г. пришёл к выводу о том, что диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, которая соответствует критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней, утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 30 января 2002 г. № 74 (в редакции постановления Правительства Российской Федерации от 20 июня 2011 г. № 475), и принял решение присудить

Сидоровой Ольге Владимировне ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 человек, из них 8 докторов наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании, из 22 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение учёной степени 16, против присуждения учёной степени – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель
диссертационного совета

Ученый секретарь
диссертационного совета

20 ноября 2015 г.



Гуртов Валерий Алексеевич

Пикулев Виталий Борисович

Подпись руки	<i>проф. В.А. Гуртов</i>
	<i>доц. В.Б. Пикулев</i>
УДОСТОВЕРЯЮ.	<i>[Signature]</i>
Уч. секретарь ученого совета	<i>Сурмачю А.И.</i>
« 20 »	<i>ноября</i> 20 <i>15</i> г.