

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 03 апреля 2015 г. протокол № 8

О присуждении **Скориковой Ниёле Станиславовне**, гражданке Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация *«Рентгенографическое исследование высокодисперсных кремнезёмных порошков, синтезированных на основе жидкого стекла»* в виде рукописи по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния принята к защите

15 января 2015 г., протокол № 2 диссертационным советом Д 212.190.06 на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Петрозаводский государственный университет» (ФГБОУ ВПО ПетрГУ) (185910, г. Петрозаводск, пр. Ленина, 33, действующего на основании приказа Министерства образования и науки Российской Федерации №156/нк от 1 апреля 2013 года).

Соискатель Скорикова Ниёле Станиславовна, 1984 года рождения, на момент защиты работает на кафедре физики твердого тела физико-технического факультета ФГБОУ ВПО ПетрГУ в должности инженера 2 категории. В 2007 году соискатель окончила магистратуру ФГБОУ ВПО ПетрГУ по направлению «Физика» с присвоением дополнительной квалификации «Преподаватель высшей школы». В 2013 году окончила очную аспирантуру ФГБОУ ВПО ПетрГУ по направлению 01.04.07 физика конденсированного состояния.

Диссертация выполнена на кафедре физики твердого тела физико-технического факультета ФГБОУ ВПО ПетрГУ.

Научный руководитель - доктор физико-математических наук, доцент **Фофанов Анатолий Дмитриевич** работает в должности профессора кафедры физики твердого тела физико-технического факультета ФГБОУ ВПО ПетрГУ.

Официальные оппоненты:

1. **Цыбуля Сергей Васильевич**, гражданин Российской Федерации, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией структурных методов исследования Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук,

2. **Ивашевская Светлана Николаевна**, гражданка Российской Федерации, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт геологии Карельского научного центра Российской академии наук, дали **положительные** отзывы на диссертацию.

Ведущая организация **Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» (МГУ)**, г. Москва, в своем **положительном** заключении, подписанном заведующим кафедрой физики твердого тела физического факультета МГУ, доктором физико-математических наук, профессором *Илюшиным Александром Сергеевичем* и доцентом кафедры физики твердого тела физического факультета МГУ, кандидатом физико-математических наук, *Авдюхиной Валентиной Михайловной* и утверждённым проректором МГУ, доктором физико-математических наук, профессором *Федяниным Андреем Анатольевичем*, указала, что «диссертация убедительно демонстрирует высокую профессиональную квалификацию соискателя», а также «полностью удовлетворяет требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842) для кандидатских диссертаций». Отзыв о диссертационной работе Скориковой Н.С. рассмотрен и одобрен на заседании Ученого совета Отделения физики твердого тела физического факультета МГУ от 19 февраля 2015 г., протокол № 1.

Соискатель имеет 14 опубликованных работ, из них по теме диссертации опубликовано 10 научных работ общим объёмом 6,5 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, а также 1 работа в зарубежном научном издании (Беларусь). 6 работ опубликованы в материалах всероссийских и международных конференций и симпозиумов.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Скорикова Н.С. Структурное состояние ксерогелей на основе жидкого стекла, модифицированных никелем, кобальтом и титаном / Н.С. Скорикова, А.Д. Фофанов, Р.Н. Осауленко, Л.А. Алешина, Е.Ф. Кудина // Ученые записки Петрозаводского государственного университета. Серия Естественные и технические науки. – 2013. – № 6 (135). – С. 94-101

2. Скорикова Н.С. Анализ структуры ксерогелей на основе жидкого стекла в рамках модели хаотически разориентированных кристаллитов / Н.С. Скорикова, А.Д. Фофанов // Фундаментальные исследования. – 2014. – № 8 (часть 6). – С. 1356-1363

3. Васильева (Скорикова) Н.С. Рентгенографические исследования ксерогелей на основе жидкого стекла, полученных при различных условиях / Н.С. Васильева (Скорикова), Л.А. Алешина, А.Д. Фофанов, Е.Ф. Кудина // Материалы. Технологии, Инструменты. – 2011. – Т.16. – №4. – С.89-94

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. **Гольдаде Виктора Антоновича**, профессора, доктора технических наук, ведущего научного сотрудника Государственного научного учреждения «Институт механики металлополимерных систем им. В.А. Белого Национальной академии наук Беларуси» и **Винидиктовой Натальи Сергеевны**, кандидата технических наук, старшего научного сотрудника Государственного научного учреждения «Институт механики металлополимерных систем им. В.А. Белого Национальной академии наук Беларуси»;

2. **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: при дегидратации немодифицированных ксерогелей было зафиксировано присутствие кристаллической фазы $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$. Было бы

интересно посмотреть поведение этой фазы при моделировании структуры образца немодифицированного ксерогеля.

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

4. **Ракина Владимира Ивановича**, доктора геолого-минералогических наук, главного научного сотрудника Федерального бюджетного учреждения науки «Институт геологии Коми научного центра Уральского отделения Российской академии наук».

Замечания:

а). Моделирование ближнего порядка в ксерогелях диссертант выполнил методом молекулярной динамики. В качестве потенциала межатомных взаимодействий был выбран потенциал Борна-Хиггинса-Майера. Конечно, данный вид представления обладает рядом преимуществ по сравнению с потенциалами Леннарда-Джонса или Морзе. Но обсуждение этого вопроса по нашему мнению улучшило бы описание методики, как в диссертации, так и в тексте автореферата.

б). К сожалению, автор не разместил в автореферате результаты расчетов рентгенографических кривых по модельным системам в сравнении с эмпирическими данными и не обсуждает в автореферате детали этого важнейшего анализа проведенного в диссертации.

5. **Петракова Анатолия Павловича**, доктор физико-математических наук, заведующего кафедрой инженерной физики и техносферной безопасности Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Сыктывкарский государственный университет».

6. **Кременецкого Вячеслава Георгиевича**, кандидата химических наук, старшего научного сотрудника лаборатории высокотемпературной химии и электрохимии Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья имени И.В. Тананаева Кольского научного центра Российской академии наук».

Замечания:

а). Из автореферата не видно, было ли проведено сопоставление рентгеноструктурных методов анализа с другими методами исследования, в частности, со спектроскопическими данными.

б). Не вполне ясно, в чем различие «концентрационных» и «структурных» неоднородностей.

в). Не указаны методические параметры условий компьютерного эксперимента и не охарактеризована сама программа, предназначенная для проведения молекулярно-динамических расчетов.

г). Недостаточно конкретным представляется утверждение о том, что «катионы натрия взаимодействуют с анионами солей» (страницы 16 и 20 автореферата).

7. **Рожковой Натальи Николаевны**, доктора химических наук, заведующей лабораторией физико-химических исследований наноуглеродных материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт геологии Карельского научного центра Российской академии наук.

Все отзывы, поступившие на диссертацию и автореферат, **положительные** (из них 3 отзыва с замечаниями, указанными выше) и заканчиваются выводом, что диссертационная работа Скориковой Н.С. полностью соответствует требованиям, которые ВАК предъявляет к кандидатским диссертациям, а её автор – Скорикова Н.С. – 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.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

получены новые экспериментальные данные о структурном состоянии в области ближнего упорядочения ксерогелей на основе жидкого стекла состава $\text{Na}_2\text{Si}_3\text{O}_7$ в исходном состоянии и после их модификации солями кобальта, никеля, титана и железа;

предложена модель, описывающая структурно-неоднородное состояние указанных материалов, в виде смеси наноразмерных областей когерентного рассеяния различного состава и структуры;

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

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

изложены и корректно обоснованы особенности применения методов рентгеноструктурного анализа при исследованиях различных многокомпонентных структурно-неоднородных материалов в некристаллическом состоянии;

раскрыт характер влияния условий дегидратации и процесса старения на характеристики ближнего порядка ксерогелей в нативном состоянии;

изучено влияние различных модификаторов, в роли которых выступали соли металлов (кобальта, никеля, титана и железа), на атомную структуру ксерогелей на основе жидкого стекла и обнаружено, что возникающий характер расположения атомов в области ближнего упорядочения отличается от такового в кристаллах близкого химического состава; *установлено*, что данный факт связан с присутствием в модифицированных образцах концентрационных и структурных неоднородностей, тип которых определяется как катионом металла-модификатора, так и анионом соли (в частности, катионы натрия в процессе модифицирования взаимодействуют с анионами солей, чем вызывают возрастание доли областей когерентного рассеяния, обедненных натрием);

доказано, что ксерогели на основе жидкого стекла, модифицированные солями кобальта, никеля, титана и железа, являются удобными модельными объектами при исследовании аморфных структурно-неоднородных материалов;

проведена модернизация алгоритмов построения стартовых моделей для молекулярно-динамического эксперимента с целью моделирования структурных неоднородностей:

предложен алгоритм создания стартовых конфигураций в виде сферического кластера кремнеземного состава, окруженного шаровым слоем, содержащим ионы-модификаторы.

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

определены пределы и возможности практического использования метода Уоррена-Финбака к анализу структуры ксерогелей на основе жидкого стекла;

созданы практические рекомендации по расчету характеристик ближнего порядка (координационных чисел, радиусов координационных сфер) и построению моделей областей ближнего упорядочения многокомпонентных структурно-неоднородных некристаллических материалов;

представлены и обоснованы пути по дальнейшему развитию методов анализа дифракционных картин ксерогелей на основе жидкого стекла.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

результаты получены на сертифицированном оборудовании, в работе использованы современные методы получения и обработки данных рентгенодифракционного эксперимента и компьютерного моделирования для создания моделей 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 немодифицированных исходных ксерогелей.

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

