

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу
Скориковой Ниёле Станиславовны

“Рентгенографическое исследование высокодисперсных
модифицированных кремнезёмных порошков, синтезированных на основе
жидкого стекла ”,

представленную на соискание ученой степени кандидата физико-
математических наук по специальности 01.04.07 – физика
конденсированного состояния

Работа посвящена рентгеновскому исследованию структуры кремнезёмных порошков, синтезированных на основе жидкого стекла, с целью получения количественных характеристик ближнего порядка. Особую актуальность работе придает математическое моделирование структуры исследуемых объектов, дополняющее эксперимент, что позволяет углубить трактовку полученных данных и может привести в дальнейшем к более широкому использованию математического моделирования в области исследования аморфных материалов.

Работа, общим объемом 149 страниц, состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы, содержащего 122 наименований.

Во введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулированы цель и задачи, указана научная и практическая значимость результатов, описана структура диссертации, ее апробация и основные результаты, выносимые на защиту.

В первой главе проведен обзор литературных данных по теме работы. Глава включает в себя четыре раздела. В первом рассматриваются основные модельные представления о структуре материалов в стеклообразном состоянии и современные методы их исследования. Второй раздел представляет обзор исследований атомной структуры систем $\text{Na}_2\text{O} \cdot n\text{SiO}_2$ в кристаллическом и аморфном состояниях. В третьем разделе, изложены вопросы, касающиеся модифицирования жидкого стекла и исследованию ближнего порядка в многокомпонентных системах. Детально рассмотрены проблемы, касающиеся изучения окружения

катионов металлов в аморфных силикатных материалах. Четвертый раздел включает в себя описание современных методов компьютерного моделирования структуры аморфных кремнеземов.

Во второй главе рассмотрены методики экспериментов и обработки экспериментальных данных. Глава состоит из пяти разделов. В первом разделе рассмотрена методика приготовления металлосиликатных порошков, полученных по золь-гель технологии из систем на основе щелочно-силикатного раствора, описан способ их модифицирования солями металлов, приведено описание химического состава и подготовка образцов для рентгенографирования. Во втором разделе излагается методика проведения рентгеноструктурных исследований. В третьем разделе, дано подробное описание методики обработки полученных экспериментальных данных: метод Уоррена-Финбака и особенности расчета характеристик ближнего порядка для многокомпонентных некристаллических систем. В четвертом разделе представлена методика построения теоретических картин рассеяния рентгеновских лучей совокупностью разориентированных кластеров атомов. В заключительном пятом разделе рассматривается моделирование ближнего порядка в ксерогелях на основе жидкого стекла методом молекулярной динамики.

Третья глава описывает изучение ближнего порядка в ксерогелях на основе жидкого стекла. В первом разделе обсуждается рентгенографическое исследование ксерогелей в исходном состоянии, а во втором – модифицированных солями металлов. Рассмотрено влияние процесса старения на структурное состояние исследуемых образцов, исследовано изменение ближнего порядка в ксерогеле после введения модифицирующих добавок.

В четвертой главе рассмотрены два подхода к построению моделей структуры ксерогелей на основе жидкого стекла: модели хаотически разориентированных кристаллитов и метода молекулярной динамики.

В заключении кратко перечислены основные результаты работы.

Научная новизна рассматриваемой диссертационной работы заключается в том, что впервые определены количественные характеристики ближнего порядка ксерогелей на основе жидкого стекла в исходном состоянии и после их модификации солями кобальта, никеля, титана, железа и обосновано описание структуры ксерогелей, модифицированных солями металлов, в рамках модели механической смеси ультрамалых кристаллитов различных фаз, размеров и формы.

Практическая значимость работы заключается в том, что полученные результаты могут быть использованы для воссоздания реальной картины структурных изменений, происходящих при изготовлении, хранении и модифицировании композиционных материалов с заданным набором свойств. Выдвигаемые автором научные представления и выводы обоснованы и достоверны. Оформление диссертации соответствует требованиям.

Содержание диссертации в достаточной степени отражено в публикациях автора, неоднократно докладывалось на научных конференциях.

По содержанию диссертации имеются следующие **замечания**.

1. Рисунки 1.7, 4.15, 4.20, 4.26 в серых тонах очень неразборчивы. Возможно, они были бы более информативны в цветном варианте. Так рисунок 1.7 в исходной статье цветной и очень хорошо читается.
2. В подписях к рисунку 1.3 (стр. 17) и 1.5 (стр. 23) отсутствуют обозначения.
3. Моноклинная пространственная группа №14 обычно обозначается $P2_1/c$ или $P12_1/c1$. В тексте диссертации на страницах 10, 21 и 145 она обозначена как $P2_1/c1$.
4. На странице 18 использована некорректная формулировка «ИК спектроскопия, включая рамановское рассеяние», так как речь идет о различных взаимодополняющих методах.

В целом, работа Скориковой Н.С. выполнена на высоком уровне, и представляет собой самостоятельное законченное исследование, в котором содержится решение важной научно-практической задачи: анализа структурных характеристик комплексных аморфных материалов методами РСА и компьютерного моделирования. Анализ диссертации позволяет сделать заключение о высоком теоретическом уровне и практической значимости полученных в ней результатов. Указанные замечания не снижают ее ценности. Работа обладает четкой структурой, материал подается автором в логической последовательности, продиктованной поставленной целью и раскрывающими ее задачами. Диссертация содержит необходимое количество иллюстративного материала, проведен тщательный обзор литературы по теме исследования. Автореферат диссертации и публикации по ней полностью отражают научную новизну и содержание работы. Диссертация выполнена в соответствии с требованиями ВАК РФ, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор, Скорикова Ниёле Станиславовна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

научный сотрудник
Федерального государственного
бюджетного учреждения науки
Института геологии Карельского
научного центра Российской академии наук
кандидат физико-математических наук,
e-mail: ivashevskaja@yahoo.com
185910, г. Петрозаводск,
ул. Пушкинская 11
Тел. (8142) 78 27 53

Ивашевская

/С.Н.Ивашевская/

ПОДПИСЬ ЗАВЕРЯЮ

ВРИО СТ, ДОКУМЕНТОВЕДА
О. А. ПОВЕРИНОВА *Поверина*
10 марта 2015 г.

