

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ
БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ХИМИИ И ТЕХНОЛОГИИ
РЕДКИХ ЭЛЕМЕНТОВ И
МИНЕРАЛЬНОГО СЫРЬЯ
им. И.В. Тананаева
КОЛЬСКОГО НАУЧНОГО ЦЕНТРА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИХТРЭМС КНЦ РАН)
Академгородок, 26а, Апатиты, Мурманская обл.
Россия, 184209
Факс (815-55)6-16-58, тел (815-55) 79-5-49, 7-52-95
E-mail office@chemistry.kolasc.net.ru
ОКПО 04694169, ИНН 5101100177, ОГРН 1025100508597

Ученому секретарю
диссертационного совета
Д 212.190.06
к.ф-м.н. В. Б. Пикулеву
185910, Республика Карелия,
г. Петрозаводск,
пр. Ленина, 33,
Петрозаводский государственный
университет

Исх.
№230-2141 от 26.02.2015

На
№ _____ от _____

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Скориковой Н. С. "РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКОЕ
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЫСОКОДИСПЕРСНЫХ МОДИФИЦИРОВАННЫХ
КРЕМНЕЗЁМНЫХ ПОРОШКОВ, СИНТЕЗИРОВАННЫХ НА ОСНОВЕ
ЖИДКОГО СТЕКЛА",

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

Работа Скориковой Н.С. "Рентгенографическое исследование
высокодисперсных модифицированных кремнезёмных порошков,
синтезированных на основе жидкого стекла" направлена на решение одной из
актуальных задач структурной диагностики аморфных материалов, а именно, на
совершенствование методов анализа структурных характеристик исходных и
модифицированных ксерогелей.

Актуальность работы не вызывает сомнения; если учесть широкое
применение материалов на основе кремнезема в самых разных областях науки и
техники.

Диагностика частично или полностью аморфизованных материалов является весьма сложной задачей. Применение рентгенографических методов в данном случае является вполне обоснованным, так как позволяет, как минимум, дать некую интегральную характеристику анализируемому объекту.

В то же время неоднозначность интерпретации дифракционных данных для указанных материалов порождает необходимость привлечения дополнительных сведений об объемной структуре. В данном случае дополнительным методом исследования вполне логично избран метод молекулярной динамики. **Обоснование и формулировка проблемы сделаны корректно и убедительно.**

Новизна и практическая ценность работы определяются, с одной стороны, отсутствием систематических исследований указанных материалов, а с другой стороны, наличием широкого спектра разрабатываемых, исследуемых и готовых товарных продуктов на основе модифицированных кремнеземов.

К достоинствам работы соискателя следует, несомненно, отнести упомянутое сочетание дифракционного и компьютерного эксперимента, которое привело к ряду весьма интересных выводов и, тем самым, показало плодотворность избранного подхода. В частности, следует отметить методический аспект формирования стартовых моделей для молекулярной динамики. Идея создания стартовой конфигурации с формированием вокруг кремнезёмной сферы шарового слоя, содержащего ионы-модификаторы, представляется очень органичной и плодотворной при исследовании именно данных материалов. Не случайно на основе этого подхода были получены весьма интересные выводы, касающиеся объемного распределения кобальта в кремнезёмной матрице.

По работе можно высказать некоторые замечания:

- 1) Из автореферата не видно, было ли проведено сопоставление рентгеноструктурных методов анализа с другими методами исследования, в частности, со спектроскопическими данными.
- 2) Не вполне ясно, в чем состоит различие "концентрационных" и "структурных" неоднородностей.

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

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

Приведенные замечания принципиально не затрагивают ценности полученных результатов.

В целом диссертационная работа Скориковой Н.С. оставляет благоприятное впечатление своей цельностью и систематичностью, прекрасным научным и методическим уровнем. Автореферат диссертации и опубликованные по ней материалы в полной мере отражают содержание работы.

Диссертация отвечает требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (в редакции постановления Правительства Российской Федерации от 24.09.13 № 842), предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Скорикова Ниёле Станиславовна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Ст. науч. сотр. лаборатории высокотемпературной химии и электрохимии, к.х.н.

Институт химии КНЦ РАН, Академгородок, 26а,
Апатиты, Мурманской обл. 184209
тел. 7(81555)79129. E-Mail: kreme_vg@chemistry.kolasc.net.ru

В.Г. Кременецкий



Подпись *Участник совета* 26.02.2015 г.

По месту работы удостоверяю:
зав.канцелярией
ИХТРЭМС КНЦ РАН
Л. Орасова
« 26 » февраля 2015 г.