

ОТЗЫВ

об автореферате диссертации Скориковой Ниёле Станиславовны "РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЫСОКОДИСПЕРСНЫХ МОДИФИЦИРОВАННЫХ КРЕМНЕЗЕМНЫХ ПОРОШКОВ, СИНТЕЗИРОВАННЫХ НА ОСНОВЕ ЖИДКОГО СТЕКЛА"

Диссертация Н.С. Скориковой посвящена исследованию структурных состояний аморфных продуктов золь-гель синтеза водорастворимых силикатов натрия с добавлением солей металлов – традиционного объекта неорганической химии, рентгенографическим методом, что является непростой физической задачей.

В работе, на основе компьютерного моделирования и рентгенографического анализа некристаллических материалов показано, что структурно-неоднородное (некристаллическое рентгеноаморфное) состояние ксерогелей на основе жидкого стекла, модифицированных солями металлов, может быть описано моделью механической смеси ультрамалых кристаллитов различных фаз. Автором построены структурные модели областей когерентного рассеяния ксерогелей и произведен отбор наиболее вероятных для описания объектов исследования. Важно также, что изучен характер структурных изменений при введении модификаторов в состав гелей.

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.

Результаты, полученные диссертантом при использовании метода молекулярной динамики весьма любопытны. Конечно, полученные "равновесные" состояния модельных систем еще не имеют ничего общего с истинно равновесным кристаллическим состоянием системы, но "равновесное" состояние в ближнем порядке достоверно обнаружено. Выполнен подробный анализ взаимодействия отдельных ионов с кремнекислородными тетраэдрами. 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.

Работа в целом выполнена на высоком научно-методическом уровне, характерном для научной школы, эффективно развивающейся на кафедре физики твердого тела физико-технического факультета Петрозаводского государственного университета, и вполне отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Я, Ракин Владимир Иванович, даю свое согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета Д 212.190.06.

Гл. науч.сотрудник ИГ Коми НЦ
УрО РАН, д.г.-м.н.

В.И.Ракин

5 марта 2015 г.

167982, ул. Первомайская, 54, г. Сыктывкар,
телефон: (8212) 44-22-16,
e-mail: rakin@geo.komisc.ru



Подпись	<i>В.И. Ракин</i>
удостоверяю.	
Начальник общего отдела Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института геологии Коми научного центра Уральского отделения Российской академии наук	
05	03
	20 15 г.