



КОНЦЕРН «АВТОМАТИКА»

**АКЦИОНЕРНОЕ ОБЩЕСТВО
«ПЕНЗЕНСКИЙ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ЭЛЕКТРОТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ»
(АО «ПНИЭИ»)**

ул. Советская, 9 г. Пенза 440000 Факс: (841-2) 59-33-50, тел. (841-2) 59-33-35
e-mail: info@penza.ru, info@pniei.penza.ru http://www.pniei.pf
ОКПО 07509190 ОГРН 1115836009255 ИНН 5836649358 КПП 583601001

УТВЕРЖДАЮ
Зам. генерального директора
АО «ПНИЭИ», к.т.н.

С.Е. Трифонов

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Макарова Валерия Николаевича, выполненной на тему «Описание структурных превращений в оксидах железа и алюмосиликатах, составляющих природные глинистые минералы, на основе энергетического подхода» и представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – «Физика конденсированного состояния»

«17» марта 2022 г.

г. Пенза

В последнее время в качестве сырьевых ресурсов для новых функциональных материалов огромный интерес вызывают природные глинистые минералы, которые обладают рядом уникальных свойств. Для создания новых функциональных материалов на основе глин необходимо изучить в первую очередь влияние физических внешних воздействий на кристаллические структуры оксидов и алюмосиликатов, составляющих основу глин, разработать методологию простых и быстровыполнимых расчетов энергетических состояний кристаллических решеток оксидов и алюмосиликатов, а также их трансформации при внешних воздействиях. Диссертационная работа В.Н. Макарова, исследующая структурные превращения в оксидах железа и составляющих природные глинистые минералы алюмосиликатах, в настоящее время является актуальной.

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и приложений. В первой главе дан обзор структурных превращений в кристаллах оксидов и алюмосиликатов при внешних воздействиях. Во второй главе

приведен расчет энергетических характеристик элементарных ячеек полиморфных превращений в оксидах железа в СВЧ-поле и сопоставление теоретических результатов с экспериментальными исследованиями. В третьей главе на основе модели аморфизации кристаллической структуры монтмориллонита выполнен расчет энергий активации для выхода ионов из элементарной ячейки монтмориллонита. В четвертой главе представлены результаты расчета энергии элементарной ячейки каолинита в СВЧ-поле.

Научная новизна работы заключается в расчете значений энергии активации ионов в процессе аморфизации элементарной ячейки монтмориллонита в СВЧ-поле, усовершенствовании методики Харрисона и расчете значений постоянных Маделунга.

Результаты работы отражены в большом количестве публикаций, в том числе в журналах, рекомендуемых Перечнем ВАК, Scopus и Web of Science. Личный вклад автора в работу четко отражен в автореферате.

К недостатку можно отнести отсутствие в автореферате обоснования выбора ПО моделирования Quantum ESPRESSO, используемых им методов расчетов и схем аппроксимации. Данный недостаток не снижает научную и практическую значимость проведенного исследования, общую положительную характеристику полученных результатов.

Диссертационная работа соответствует специальности и требованиям пункта 9 Положения о присуждении ученых степеней (постановление Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842), предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Макаров Валерий Николаевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

Даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Начальник сектора, к.т.н.

Чернов Павел Сергеевич

Начальник ЛБНТ, к.т.н.

Майоров Александр Викторович