

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.411.03 (Д 212.263.09)
НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ТВЕРСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ» МИНИСТЕРСТВА
НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ ПО
ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА
НАУК

Аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 22.04.2022 г.

О присуждении Макарову Валерию Николаевичу, гражданину РФ, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Описание структурных превращений в оксидах железа и алюмосиликатах, составляющих природные глинистые минералы, на основе энергетического подхода» в виде рукописи по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния принята к защите 15.02.2022, протокол № 1, диссертационным советом 24.2.411.03 (Д 212.263.09), созданным на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет» Министерства науки и высшего образования РФ. Адрес: 170100, г. Тверь, ул. Желябова, 33. Приказ № 423/нк от 12.08.2013 г.

Соискатель – Макаров Валерий Николаевич, 1991 года рождения.

В 2013 году с отличием окончил федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Оренбургский государственный университет» по специальности «Энергообеспечение предприятий», в 2016 году с отличием окончил магистратуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Оренбургский государственный университет» по направлению подготовки 03.04.02 Физика, в 2020 окончил аспирантуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Оренбургский государственный университет» по направлению подготовки 03.06.01 Физика и астрономия. В настоящее время работает старшим преподавателем кафедры физики и методики преподавания физики физического факультета федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Оренбургский государственный университет» Министерства науки и высшего образования РФ.

Диссертация выполнена на кафедре биофизики и физики конденсированного состояния физического факультета федерального

государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Оренбургский государственный университет» Министерства науки и высшего образования РФ.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор Каныгина Ольга Николаевна, профессор кафедры химии, профессор кафедры физики и методики преподавания физики ФГБОУ ВО «Оренбургский государственный университет».

Официальные оппоненты:

Апкарьян Афанасий Саакович, доктор технических наук, профессор, руководитель научно-образовательного центра по нанотехнологиям ФГБУН «Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН»; Бородин Илья Николаевич, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник кафедры общей и теоретической физики ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет» – дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет», г. Ростов-на-Дону, в своем положительном отзыве, подписанном д.ф.-м.н., профессором кафедры «Нанотехнология» Рудской Анжелой Григорьевной; д.ф.-м.н., директором НИИ физики Вербенко Ильей Александровичем и утвержденном проректором по научной и исследовательской деятельности, д.х.н., с.н.с. Метелицей Анатолием Викторовичем, указала, что, диссертационная работа Макарова В.Н. соответствует требованиям предъявляемым ВАК РФ к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук (п. 9-14 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842). Диссертация соответствует специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния. Автореферат и опубликованные работы достаточно полно отражают ее содержание. Автор диссертации Макаров В.Н. заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата физико-математических наук.

Соискатель имеет 21 печатную работу, в том числе по теме диссертации опубликовано 18 работ, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 6 статей, включая 3 статьи в журналах, индексируемых в международных базах данных, 1 свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. Наиболее значимыми являются следующие работы:

1. Makarov, V.N. Model of destruction of montmorillonite crystal structure in a microwave field / V.N. Makarov, O.N. Kanygina // *Nanosystems: physics, chemistry, mathematics*. – 2020. – Vol. 11(2). - P. 153-160.

2. Фазовые превращения в оксидах железа под действием микроволнового излучения / О.Н. Каныгина, В.Л. Бердинский, М.М. Филяк,

А.Г. Четверикова, В.Н. Макаров, М.В. Овечкин // Журнал технической физики. – 2020. – Т. 90. - Вып. 8. - С. 1311-1317.

3. Макаров, В.Н. К вопросу о разрыве ковалентных связей элементарной ячейки каолинита в СВЧ-поле / В.Н. Макаров, М.М. Серегин, О.Н. Каныгина // Инженерный вестник Дона. – 2020. - №4. - С. 1-12.

4. Макаров В.Н. Расчет постоянных Маделунга для оценки энергии ионной связи в кристаллах оксидов с кубической, тетрагональной и ромбической сингониями / В.Н. Макаров // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. – 2020. - №4(56). - С. 123-136.

Подготовка публикаций выполнена соискателем совместно с научным руководителем О.Н. Каныгиной. Результаты диссертационной работы полностью отражены в опубликованных работах: представлены результаты моделирования из первых принципов электронной структуры для квантово-механического расчета кристалла каолинита; расчета постоянных Маделунга и энергий ионной связи элементарных ячеек оксидов железа для описания их структурных превращений в СВЧ-поле; описание и визуализация структурных превращений в элементарной ячейке монтмориллонита в СВЧ-поле.

На диссертацию и автореферат поступило 7 отзывов, все отзывы положительные:

1. Чернова П.С., к.т.н., начальника сектора и Майорова А.В., к.т.н., начальника ЛБНТ АО «Пензенский научно-исследовательский электротехнический институт». В качестве недостатка автореферата указывается отсутствие обоснования выбора ПО Quantum ESPRESSO для решения поставленных задач.

2. Лааса Р.А. к.т.н., директора Института развития инженерного образования, доцента отделения контроля и диагностики ФГАОУ ВО «Томский политехнический университет». В качестве недостатка в отзыве указывается отсутствие описания программного кода программы для ЭВМ, а также у рецензента вызывает сомнение необходимость рассмотрения криогенных воздействий на кристаллы оксидов.

3. Шебзуховой М.А., д.ф.-м.н., профессора кафедры физики наносистем ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова» замечаний не содержит.

4. Амосова А.П., д.ф.-м.н., профессора, заведующего кафедрой «Металловедение, порошковая металлургия, наноматериалы» ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет». В качестве недостатка отмечено, что в работе отсутствуют данные по исследованию изменения свойств оксидов при их структурных превращениях в СВЧ-поле, а также то, что в работе отсутствует фазовый состав глины и не обсуждено влияние СВЧ-воздействия на них.

5. Смирновой Е.П., к.ф.-м.н., старшего научного сотрудника ФГБУН ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН замечаний не содержит.

6. Синельщиковой О.Ю., к.х.н., старшего научного сотрудника лаборатории физико-химического конструирования и синтеза функциональных материалов ФГБУН Ордена Трудового Красного Знамени Института химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН. Имеются следующие замечания: не понятно, сопровождаются ли структурные превращения монтмориллонита в СВЧ-поле потерей массы; каким образом в работе определяется доля аморфной фазы в исходной пробе оксида железа? Также у рецензента вызывают сомнения описание структурных превращений в оксидах железа, и, в качестве рекомендации, предлагается исключить аморфную фазу для получения более точных экспериментальных результатов.

7. Арутюнян В.С., к.ф.-м.н., ведущего научного сотрудника кафедры физики твердого тела Ереванского государственного университета замечаний не содержит.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что официальные оппоненты и работники ведущей организации являются известными специалистами по изучаемой проблематике и имеют большое число публикаций по теме диссертации. Официальный оппонент А.С. Апкарьян является одним из ведущих российских специалистов по исследованию глинистых минералов, в том числе по анализу структурных превращений в алюмосиликатах, а официальный оппонент И.Н. Бородин имеет большой опыт по моделированию и анализу различных свойств нано-, микро- и мезоразмерных систем.

Диссертационный совет отмечает, что выполненные соискателем исследования вносят значительный вклад в описание структурных превращений в оксидах железа и алюмосиликатах на основе энергетического подхода; **предложена** методика прогнозирования возможности реализации полиморфных превращений в оксидах железа типа магнетит (гематит) – маггемит в СВЧ-поле; **усовершенствована** методика Харрисона, позволяющая рассчитывать значения постоянных Маделунга для кристаллов не только кубической, но и тетрагональной и ромбической сингоний, т.е. дающая возможность определения энергий ионных связей в элементарных ячейках кристаллов глинистых минералов; **установлено**, что процесс аморфизации монтмориллонита в СВЧ-поле проходит в 4 этапа; **оценены** значения энергий активации ионов в процессе аморфизации (перестройки) элементарной ячейки монтмориллонита в СВЧ-поле; **предложен** принцип подбора показателей Борна для ионов (Si^{+4} , Ti^{+4} , Fe^{2+} , Fe^{3+}), входящих в химический состав оксидов монтмориллонитовой глины; **установлено**, что в элементарной ячейке

каолинита в СВЧ-поле в сухой воздушной среде разрыва ковалентных связей не происходит.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что: развит энергетический подход для описания и прогнозирования структурных превращений в кристаллах оксидов и алюмосиликатов, составляющих основу природных глин, с учетом воздействия СВЧ-поля; **обоснован** процесс полиморфного превращения в оксидах железа типа магнетит-гематит – маггемит в СВЧ-поле.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что: разработана программа для ЭВМ, позволяющая рассчитывать постоянные Маделунга для кристаллов кубической и тетрагональной сингоний; **представлен** энергетический анализ четырех этапов аморфизации кристаллической структуры монтмориллонита, демонстрирующий принципиальную возможность реализации процессов создания материалов с заданной степенью кристалличности и трансформации природных оксидов в новые функциональные материалы; **развита** научно-исследовательская база для разработки технологий использования богатых минеральных ресурсов Оренбургской области и ближних районов России в производстве новых функциональных материалов.

Оценка достоверности результатов исследования выявила: полученные автором результаты обеспечены высоким уровнем строгости разработанных математических моделей, использованием в экспериментах гостированных и апробированных методик измерения, применением компьютерных методов анализа и обработки экспериментальных данных, а также публикациями в высокорейтинговых изданиях, которые включают независимую экспертизу, проведенную при рецензировании статей; исследования подтверждены воспроизводимостью экспериментальных результатов.

Личный вклад соискателя состоит в расчёте на основе энергетического подхода ионных энергий для элементарных ячеек магнетита, гематита и маггемита для доказательства возможности реализации полиморфных превращений; усовершенствовании метода Харрисона, который теперь позволяет рассчитывать постоянные Маделунга для кристаллов тетрагональной и ромбической сингоний, и разработки на его основе программы для ЭВМ. Соискатель описал модель 4-х этапной аморфизации элементарной ячейки монтмориллонита в СВЧ-поле, доказанной экспериментально; произвел квантово-механический расчет (используя моделирование *ab initio* электронной структуры кристалла) результата воздействия СВЧ-полей на кристаллическую структуру каолинита.

В ходе защиты диссертации были высказаны следующие критические замечания: о различии в значении энтальпии для двухатомной молекулы из справочной литературы и энергии ячейки, представленной в работе, а также недостаточно четко разделены экспериментальная и теоретическая части работы.

Соискатель Макаров В.Н. ответил на задаваемые ему в ходе заседания вопросы и привел собственную аргументацию, что значение энергии ячейки зависит от числа атомов в ней, в связи с этим могут не совпадать данные для двухатомной молекулы и ячейки, но приведенные теоретические расчеты хорошо согласуются с результатами эксперимента. Экспериментально были определены дифрактограммы до и после воздействия СВЧ-полем.

Диссертация соответствует критериям Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 в текущей редакции. На заседании 22.04.2022 г. диссертационный совет принял решение за научно обоснованные теоретические разработки по описанию структурных превращений в глинистых минералах, имеющие важное значение для создания новых функциональных материалов на основе природных минералов, присудить Макарову Валерию Николаевичу ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 12 человек, из них 6 докторов наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании, из 15 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 12, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель
диссертационного совета

Пастушенков
Юрий Григорьевич

Ученый секретарь
диссертационного совета

Барабанова
Екатерина Владимировна

22.04.2022 г.