

ОТЗЫВ

на диссертацию Мусихина Анатолия Евгеньевича «Теплоемкость и плотность фононных состояний монокристаллов Li_2MoO_4 , CaMoO_4 , BaWO_4 , $\text{Na}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ », представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника.

Диссертация Мусихина А.Е. посвящена актуальной проблеме измерения низкотемпературной теплоемкости индивидуальных веществ и её использованию для расчёта термодинамических функций с использованием моделей, имеющих физический смысл. При этом сами объекты исследования (монокристаллы молибдатов и вольфраматов металлов) используются при производстве оптического оборудования, а также криогенных сцинтилляционных детекторов.

Положительной стороной диссертации является сочетание большого объёма экспериментальной работы по измерению теплоемкостей индивидуальных веществ в сочетании с их статистической обработкой и теоретическим осмыслением. Полученные результаты представляют ценность с точки зрения составления термодинамических баз данных. Развиваемые в работе методы аппроксимации плотности фононных состояний представляют интересны не только как способ изучения свойств кристаллической решётки, но и как возможный источник идей для разработки новых термодинамических моделей, аппроксимирующих термодинамические функции в широком интервале температур.

Результаты работы апробированы на международных и общероссийских конференциях, а также опубликованы в рецензируемых журналах. Список публикаций состоит из 16 наименований, из них 8 – статьи в англоязычных рецензируемых научных журналах, индексируемых Scopus.

По материалам диссертации имеются следующие вопросы и замечания:

1. На стр. 69 упоминается возможность аппроксимации спектра фононных состояний набором дельта-функций Дирака. Насколько этот подход близок к используемому в т.н. базах данных CALPHAD третьего поколения? В них теплоёмкость аппроксимируется взвешенной суммой функций Эйнштейна и полиномов. Полиномы используются для аппроксимации ангармонизма, электронная теплоёмкости и разницы между изобарной и изохорной теплоемкостями. См., например [Bigdeli S. et al. // J. Phase Equilib. Diffus. 2018. V. 39. N 6. P. 832-840. <https://doi.org/10.1007/s11669-018-0679-3>].
2. В таблицах с табулированными значениями термодинамических функций (например, таблицы 3.9, 3.10, 3.11, 3.14, 3.15, 3.17, 3.19, 3.20) не указаны неопределённости для энтропий, энтальпий, энергий Гиббса, Гельмгольца и внутренней энергии.
3. Стр. 111 и рис. 3.8: утверждается, что плотность вероятности $P(\Delta g)$ подчиняется нормальному распределению. Однако, это не вполне очевидно из гистограмм, особенно в случае правого рисунка. В таких случаях желательно строить график эмпирической интегральной функции распределения в координатах «нормальной вероятностной бумаги», а также использовать статистические критерии (Пирсона, Колмогорова-Смирнова и т.п.).

4. Стр. 92, рис. 2.18, стр. 93, рис. 2.19 и стр. 94 рис. 2.20. Не вполне понятно, как доказывалось, что отдельно стоящие полосы с $\omega \approx 4000$ К связаны не с ангармонизмом или явлениями предплавления, а с колебаниями атомов водорода.
5. Возможно ли использовать плотность фоонных состояний для экстраполяции к 0 К вместо уравнения (132) со стр. 103, а также вместо сглаживания по методу Румшицкого (стр. 144)?

Несмотря на вопросы и замечания, считаю, что диссертация Мусихина А.Е. соответствует требованиям «Положения о присуждении ученых степеней (п. 9), утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. (ред. От 01.10.2018)», и п. 6 паспорта специальности 01.04.14 – «Теплофизика и теоретическая теплотехника», а её автор Мусихин Анатолий Евгеньевич заслуживает присуждения ему учёной степени кандидата физико-математических наук по названной специальности.

Я, Восков Алексей Леонидович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой диссертации А.Е. Мусихина, и их дальнейшую обработку.

Старший научный сотрудник лаборатории химической термодинамики кафедры физической химии Химического факультета Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова, кандидат химических наук

26 января 2021 г.

Восков

Восков Алексей Леонидович

Ларионов



Сведения о лице, предоставившем отзыв на диссертацию Мусихина Анатолия Евгеньевича «Теплоемкость и плотность фоонных состояний монокристаллов Li_2MoO_4 , CaMoO_4 , BaWO_4 , $\text{Na}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ », представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.14 – «Теплофизика и теоретическая теплотехника»

1	Ф.И.О.	Ученая степень	Сведения о работе		
			Полное наименование организации	Почтовый адрес, телефон, адрес электронной почты	Должность с указанием структурного подразделения
1	2	3	4	5	6
	Восков Алексей Леонидович	Кандидат химических наук (по специальности 02.00.04 «Физическая химия»)	Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»	119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д.1, стр.3, комн. Ц18-26. Тел.: +7-910-459-67-73 E-mail: alvoskov@gmail.com	Старший научный сотрудник лаборатории химической термодинамики химического факультета МГУ