

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ЭКСПЕРТНОЙ КОМИССИИ

Диссертационного совета Д 003.053.01 при ИТ СО РАН о диссертационной работе Мусихина Анатолия Евгеньевича «Теплоемкость и плотность фоонных состояний монокристаллов Li_2MoO_4 , CaMoO_4 , BaWO_4 , $\text{Na}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ » по специальности 01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

1. Диссертационная работа выполнена в научно-исследовательской лаборатории термодинамики неорганических материалов (№ 406) в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук (ИНХ СО РАН).

2. Работа посвящена экспериментальному исследованию теплоемкости в широкой области низких температур и получению на этой основе ряда физико-химических характеристик, включая термодинамические потенциалы и плотность фоонных состояний для монокристаллов молибдатов и вольфраматов щелочных металлов.

В процессе выполнения диссертационной работы были поставлены и решены следующие задачи:

- измерение теплоемкости монокристаллических образцов Li_2MoO_4 , CaMoO_4 , BaWO_4 и $\text{Na}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ методом вакуумной адиабатической калориметрии в интервале температур 6–310 К;
- анализ температурной зависимости теплоемкости при низких температурах и получение на этой основе характеристик, связанных с выявленными особенностями и закономерностями;
- вычисление для объектов исследования термодинамических функций при постоянном давлении: энтропии, энтальпии и энергии Гиббса в интервале 0–310 К;
- развитие нового подхода для численного решения обратной задачи восстановления плотности фоонных состояний твердого тела на основе его низкотемпературной теплоемкости;
- расчет плотности фоонных состояний исследуемых объектов исходя из полученной экспериментально теплоемкости;
- вычисление изохорных термодинамических функций во всей области существования твердой фазы, основных характеристических температур, связанных с моментами плотности состояний, и энергии нулевых колебаний на основе плотности фоонных состояний.

3. Основные результаты диссертационной работы Мусихина Анатолия Евгеньевича обладают научной новизной, теоретической и практической значимостью. Среди них:

- впервые получены прецизионные экспериментальные данные о теплоемкости монокристаллических образцов: Li_2MoO_4 , CaMoO_4 , BaWO_4 и $\text{Na}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ адиабатическим методом в интервале от гелиевых до комнатных температур, выполнен анализ температурной зависимости теплоемкости и проведено сравнение с известными литературными данными;
- развит новый метод численного решения обратной задачи, позволяющий вычислять из низкотемпературной теплоемкости плотность фононных состояний. Полученная плотность состояний описывает изохорную теплоемкость во всей области существования твердой фазы с высокой точностью. Сделана проверка метода на ряде модельных и реальных объектов различной степени сложности;
- предложен алгоритм вычисления энергии нулевых колебаний кристаллической решетки;
- получена плотность фононных состояний для исследованных монокристаллов (впервые для молибдата лития и димолибдата натрия), сделано сравнение с характеристиками колебательных спектров, приведенных в литературе;
- разработаны справочные таблицы свойств исследуемых объектов для научного и практического использования, включающие основные термодинамические потенциалы при постоянном давлении в интервале от 0 до 310 К и при постоянном объеме во всей области существования твердой фазы одной структуры; основные характеристические температуры и энергию нулевых колебаний.

4. Рассмотрев содержание диссертации и автореферата, комиссия пришла к выводу, что тема диссертации, а также ее содержание соответствуют научной специальности 01.04.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника по физико-математическим наукам.

По теме диссертации опубликовано 12 работ в печатных изданиях, входящих в перечень ВАК. Основные результаты работы представлены в 19 докладах на 6 всероссийских (9 тезисов) и 5 международных (10 тезисов) конференциях и симпозиумах. Комиссия считает, что материалы диссертации в полной мере опубликованы в рецензируемых научных изданиях. Требования к публикациям, предусмотренные пунктами 11, 13 «Положения о присуждении учёных степеней», соблюдены.

Разработка плана исследования и постановка задач диссертационной работы выполнялась автором совместно с научным руководителем к.ф.-м.н. Наумовым Виктором Николаевичем. Экспериментальные измерения теплоемкости выполнялись автором при участии научного руководителя к.ф.-м.н. Беспятова Михаила

Александровича. Обзор литературы по теме исследований, обработка полученных экспериментально данных, расчеты с проведением анализа и интерпретацией результатов выполнялись непосредственно соискателем. Обсуждение полученных результатов, подготовка и написание публикаций по теме диссертации выполнялась совместно с научным руководителем и соавторами. Материалы других авторов, использованные в диссертации Мусихина А.Е., во всех случаях содержат ссылку на источник и удовлетворяют требованиям пункта 14 «Положения о присуждении учёных степеней».

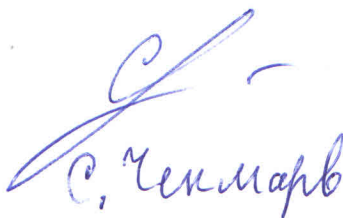
Экспертная комиссия рекомендует принять к защите диссертационную работу Мусихина А.Е. «Теплоемкость и плотность фононных состояний монокристаллов Li_2MoO_4 , CaMoO_4 , BaWO_4 , $\text{Na}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ » по специальности 01.04.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук в диссертационном совете Д 003.053.01 при ИТ СО РАН.

Председатель комиссии:
д.ф.-м.н., профессор



Станкус Сергей Всеволодович

Члены комиссии:
д.ф.-м.н.



Новопашин Сергей Андреевич

д.ф.-м.н., профессор



Чекмарёв Сергей Фёдорович