

ОТЗЫВ

На автореферат диссертации **Королевой Ольги Николаевны** «Физико-химическое моделирование структуры силикатных и германатных расплавов с учетом данных высокотемпературной спектроскопии комбинационного рассеяния света», представленной на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия

Экспериментальное изучение строения оксидных расплавов *in-situ* сопряжено с рядом технических трудностей. Щелочные германатные стекла и расплавы при нормальном давлении можно рассматривать как аналоги высокобарических силикатных систем. Атомы германия могут изменять свое координационное число в зависимости от содержания оксида щелочного металла, тогда как атомы кремния изменяют координационное число при большом давлении. В связи с этим работа Королевой Ольги Николаевны по моделированию структуры силикатных и германатных расплавов является актуальной и имеет научную значимость, в том числе для решения фундаментальной проблемы строения мантийных расплавов.

Диссертантом была проведена значительная работа по физико-химическому моделированию щелочных силикатных и германатных систем. Моделирование проводилось с использованием современного программного комплекса «Селектор-С» разработанного в Институте геохимии СО РАН. Результаты моделирования сопоставлены с данными спектроскопии комбинационного рассеяния, полученными на созданной в Институте минералогии УрО РАН уникальной установке.

Диссертантом изучены особенности влияния типа катиона-модификатора (Li, Na, K) на структуру щелочных германатных стекол и расплавов. В научной литературе существуют различные точки зрения по поводу образования «германатной аномалии», большинство исследователей связывают нелинейное изменение физико-химических свойств в щелочных германатных стеклах с наличием шести- и/или пяти-координированных атомов германия. В диссертационной работе Королевой О.Н. впервые показана корреляция между содержанием немостиковых атомов кислорода в системе и характером «германатной аномалии» на фоне сосуществующих высококоординированных атомов ^{51}Ge и ^{61}Ge .

Одним из значимых результатов в диссертационной работе при исследовании полищелочных силикатных и германатных систем является обнаружение отклонения от аддитивности распределения структурных единиц. Диссертантом при анализе физико-химических моделей силикатных систем была показана связь Q^2 и Q^3 единиц с различными катионами-модификаторами при разных составах и температурах. В германатных системах

помимо Qⁿ-единиц рассмотрены особенности перераспределения атомов лития и калия между ⁵¹Ge, ⁶¹Ge.

Результаты диссертационной работы прошли апробацию в виде 30 докладов на Всероссийских и международных конференциях изложены в 27 статьях в реферируемых журналах, рекомендованных ВАК.

При прочтении автореферата возникли следующие вопросы и замечания:

1. На рисунках 9-14 приводится погрешность экспериментальных результатов, при этом не обсуждается погрешность моделирования.

2. Каким образом разработанный метод моделирования структуры стекол и расплавов может использоваться в прогнозировании их физико-химических свойств?

В целом, содержание и оформление автореферата не оставляет сомнений, что исследование выполнено на высоком научном уровне. Полученные Королевой О.Н. результаты и разработанные подходы могут быть полезны, не только для исследователей строения стекол и расплавов, но и для совершенствования метода физико-химического моделирования. Диссертационная работа полностью соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание степени доктора химических наук («Положения о присуждении ученых степеней»), а ее автор Королева Ольга Николаевна заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Доктор химических наук (1.4.4 Физическая химия), зав. лабораторией физических методов исследования строения и термодинамики неорганических соединений. ИОНХ им. Н.С. Курнакова РАН

Алиханян Андрей Сосович

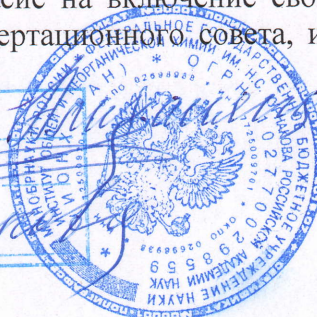
Подпись Алиханяна А.С.

заверяю

*Почтовый адрес организации: Москва, 119991, Ленинский проспект, д.31.
Электронная почта: info@igic.ras.ru*

Я, Алиханян Андрей Сосович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Подпись руки
УДОСТОВЕРЯЮ
Зав. протокольным
отд. ИОНХ РАН



10