

## 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

Диссертационная работа Королевой О.Н. посвящена методу физико-химического моделирования структуры оксидных расплавов. Автором разработан метод комплексного исследования структуры оксидных стеклообразующих расплавов, включающий в себя расчет количественного распределения структурных единиц из данных высокотемпературной спектроскопии комбинационного рассеяния света и физико-химическое моделирование структуры расплавов.

Научная новизна и практическая значимость исследования не вызывают сомнения. Впервые проведено физико-химическое моделирование щелочно-германатных расплавов в зависимости от состава и температуры. Показаны возможность определения положения максимума «германатной аномалии» и причины её проявления в стеклах и расплавах. С помощью предлагаемого метода удалось объяснить различные проявления полищелочного эффекта.

Полученные в работе результаты могут быть полезными не только в области химии, но и геохимии и материаловедения. Отдельно стоит отметить формирование базовых моделей бинарных силикатных и германатных систем, которые по сути своей представляют базу для формирования моделей более сложных многокомпонентных систем.

В целом автореферат написан ясным языком, но замечен ряд неудачных выражений. Так на странице 9 автореферата диссертант заявляет: «Пятикоординированные атомы германия  $^{51}\text{Ge}$  в стеклах были обнаружены методами рентгеновской и нейтронной дифракции [16], методом спектроскопии комбинационного рассеяния [1] и методом молекулярной динамики [17]». Но метод молекулярной динамики является методом компьютерного моделирования и существенно зависит от входных параметров и принципов, на которых построена модель. В этом плане он не является методом обнаружения. В этой связи остаётся нераскрытым вопрос о шестикоординированных атомах германия  $^{61}\text{Ge}$  при моделировании методом молекулярной динамики. И уж совсем загадочной остаётся фраза на этой же странице автореферата: «С учетом результатов исследования способов определения эмпирических функций, заменяющих неизвестные истинные значения энергии Гиббса составляющих системы [23], появилась возможность их расчета на основе экспериментальных данных о

состоянии систем, например, по их содержанию в системе». Непонятно каким образом функции могут заменять значения и что стало возможным рассчитывать.

Однако, эти досадные недочёты не снижают общего высокого уровня диссертационной работы Королевой О.Н. Её статьи по теме диссертации опубликованы в ведущих научных журналах и прошли жёсткое рецензирование, что наряду с применением новейших физико-химических методов исследования и компьютерного моделирования обеспечивает достоверность полученных результатов.

Представленная диссертация полностью соответствует требованиям пп. 9-11, 13, 14 предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени доктора наук, установленным в пунктах 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 (в действующей редакции), а ее автор Королева Ольга Николаевна несомненно заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия.

Доктор химических наук  
(специальность 04.00.02 - геохимия),  
главный научный сотрудник  
лаборатории изотопной геохимии и  
геохронологии  
Федеральное государственное бюджетное  
учреждение науки Ордена Ленина и Ордена  
Октябрьской Революции Институт  
геохимии и аналитической химии им. В.И.  
Вернадского Российской академии наук  
(ГЕОХИ РАН)  
Почтовый адрес Института: 119991, г.  
Москва, ул. Косыгина, д.19.  
Электронная почта: director@geokhi.ru

Поляков Вениамин Борисович

18 января 2023 г

Подпись руки  
удостоверяю  
Зав. науч. группой ГЕОХИ РАН

Поляков Вениамин Борисович  
Королева Ольга Николаевна