

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 разработке метода физико-химического моделирования структуры силикатных и германатных расплавов.

Актуальность данной работы не вызывает сомнений. Экспериментальное исследование и теоретическое описание структуры и свойств силикатных и германатных расплавов и стекол являются необходимыми как для развития теории конденсированного состояния, в частности, для решения проблемы природы стеклообразного состояния вещества, так и для решения прикладных задач разработки новых материалов и новых технологических процессов в металлургии и производстве стекла. Так, германатные стекла принадлежат к классу оксидных систем, строение которых до сих пор является предметом научных дискуссий. Сложность структуры германатных систем обусловлена тем, что атомы германия в них могут находиться не только в тетраэдрической, но и в шестерной и пятерной координации по кислороду. Со способностью атома германия менять свое координационное число связывают появление в бинарных щелочногерманатных системах экстремумов на кривых зависимости физических свойств стекол от их состава (германатная аномалия).

Для решения поставленных задач автором использован комплексный подход, включающий в себя как экспериментальные исследования с использованием высокотемпературной спектроскопии комбинационного рассеяния света, так и расчетные методы с использованием различных моделей, что позволило автору получить целый ряд результатов, имеющих важное научное и практическое значение.

Автором уточнена интерпретация спектров комбинационного рассеяния щелочно-силикатных стекол и расплавов с учетом второй координационной сферы кремния. Показано, что в полищелочных силикатных стеклах наблюдается неравномерное распределение катионов между структурными единицами. Интерпретированы спектры КР щелочно-германатных стекол и расплавов. Установлены закономерности распределения структурных единиц в зависимости от температуры и составов. Впервые показана корреляция между содержанием немостиковых атомов кислорода и характером германатной аномалии. Таким образом, в диссертационной работе на основании выполненных автором исследований разработаны теоретические положения,

совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение в области разработки комплексного подхода к исследованию строения оксидных стеклообразующих расплавов в зависимости от их состава и внешних условий.

Диссертационная работа прошла хорошую апробацию. Основные результаты опубликованы в 27 статьях в журналах, индексируемых в Web of Science, Scopus, Russian Science Citation Index. Материалы диссертации докладывались на 34 научных конференциях.

При чтении автореферата возникли вопросы:

1) В чем преимущество разработанных моделей по сравнению с существующими в литературе теоретическими подходами к моделированию стеклообразующих расплавов и стекол?

2) Из автореферата неясно, насколько хорошо предлагаемые физико-химические модели описывают экспериментальные данные и каков масштаб их корректировки на основе экспериментальных данных.

Высказанные вопросы и замечания не снижают общего положительного впечатления от диссертационной работы. Диссертационная работа Королевой Ольги Николаевны «Физико-химическое моделирование структуры силикатных и германатных расплавов с учетом данных высокотемпературной спектроскопии комбинационного рассеяния света» по своей актуальности, новизне, теоретической и практической значимости, объёму и глубине исследований соответствует критериям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора химических наук в соответствии с пунктами 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 заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Шахтшнейдер Татьяна Петровна
доктор химических наук
по специальности 02.00.04 - физическая химия,
старший научный сотрудник
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН (ИХТТМ СО РАН),
ученый секретарь
Адрес: 630090, г. Новосибирск, ул. Кутателадзе 18, ИХТТМ СО РАН
Телефон: (383) 332-53-44
E-mail: shah@solid.nsc.ru

Подпись г. Шахтшнейдер Т. П.
Заверяю. *Авилова Л. В.*
Делопроизводитель Авилова Л. В.
ИХТТМ СО РАН



16.01.2023