

## ОТЗЫВ

**на автореферат диссертации Королевой О.Н. на тему: «Физико-химическое моделирование структуры силикатных и германатных расплавов с учетом данных высокотемпературной спектроскопии комбинационного рассеяния света»**

представленной на соискание степени доктора химических наук по специальности

### 1.4.4. Физическая химия

Диссертационная работа Королевой О.Н. посвящена физико-химическому моделированию 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. Показано возможность определения «германатной аномалии» при физико-химическом моделировании, а также влияние температуры на полищелочной эффект. Проведено уточнение интерпретации спектров комбинационного рассеяния как щелочно-силикатных, так и щелочно-германатных систем, с учетом второй координационной сферы кремния и германия. Отдельно стоит отметить формирование базы данных структурных единиц силикатных и германатных расплавов для физико-химического моделирования методом минимизации свободной энергии Гиббса. Убедительно показано применение разработанного автором метода моделирования в процессе исследования германатных и силикатных расплавов.

В качестве замечаний можно высказать следующее.

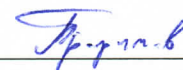
В работе приведены результаты моделирования структуры расплавов в виде распределения структурных единиц в зависимости от состава (рисунки 9, 11). Однако из текста невозможно понять, как связаны полученные данные с активностями.

Сопоставлялись ли результаты с экспериментальными данными по активностям оксидов щелочных металлов в расплавах?

По результатам диссертационной работы опубликовано 27 статей индексируемых в библиографических базах данных WoS, Scopus и RSCI. Защищаемые положения диссертации опубликованы и полностью отражены в автореферате. Имеющиеся недостатки в автореферате не принципиальны и не уменьшают значимость работы. Судя по автореферату, представленная работа полностью соответствует критериям, изложенным в пунктах 9-14 «Положения о порядке присуждения научных степеней», утвержденного Постановлением правительства РФ от 24.09.2013 №842 в редакции с изменениями, утвержденными Постановлением правительства РФ от 21.04.2016 №335, а её автор Королева Ольга Николаевна заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4. «Физическая химия».

Профессор кафедры «Материаловедение и физико-химия материалов»  
Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Южно-уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)»  
Ученая степень: доктор химических наук  
Шифр научной специальности:  
02.00.04 – «Физическая химия»

Трофимов Евгений Алексеевич



09.01.2023

Контактные данные:  
E-mail: trofimovea@susu.ru  
Адрес места работы:  
454080, г. Челябинск, пр. Ленина, 76  
ФГБОУ ВО «Южно-уральский государственный университет (НИУ)»  
Кафедра «Материаловедение и физико-химия материалов»  
Телефон: +7 951-450-66-42

Подпись Е.А. Трофимова удостоверяю

Начальник управления по работе с кадрами Южно-Уральского государственного университета

