

ОТЗЫВ

на автореферат кандидатской диссертации **Працковой Светланы Евгеньевны** «Моделирование термодинамических свойств расплавов системы Na^+ , Ca^{2+} , $\text{Al}^{3+} // \text{O}^{2-}$, F^- », представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия»

Солевые расплавы и шлаки (ионные растворы) являются важнейшим компонентом металлургических расплавов и именно их свойства определяют характер происходящих в печном агрегате процессов. Физико-химические свойства расплавленных смесей системы $\text{Na}_2\text{O} - \text{NaF} - \text{CaO} - \text{CaF}_2 - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{AlF}_3$ представляет безусловный научный и практический интерес. Ряд разрезов этой системы не может быть изучены экспериментально. Формализация термодинамических свойств данной системы с помощью более совершенного математического подхода определяет **актуальность** представленной работы.

Целью кандидатской диссертации Працковой С.Е. явилось моделирование термодинамических свойств шестикомпонентной взаимной системы Na^+ , Ca^{2+} , $\text{Al}^{3+} // \text{O}^{2-}$, F^- в рамках так называемой обобщенной модели «регулярных» ионных растворов.

В рамках принятой ионной модели оксидно-фторидных расплавов впервые удалось разделить энтальпийные и энтропийные составляющие функций смешения и избыточных функций расплавов. Определены функции смешения и избыточные функции расплавов.

Для подбора энергетических параметров обобщенной модели «регулярных» ионных растворов как функций состава и температуры оксидно-фторидных расплавов системы Na^+ , Ca^{2+} , $\text{Al}^{3+} // \text{O}^{2-}$, F^- использовали экспериментальные данные, представленные в литературе, по диаграммам состояния, теплотам смешения и наиболее достоверным термодинамическим характеристикам отдельных простых веществ и соединений, составляющих систему.

Достоверность результатов моделирования подтверждена воспроизводимостью использованных экспериментальных диаграмм, статистической значимостью параметров и высокой корреляцией с имеющимися экспериментальными данными, а также многократной апробацией материалов диссертации на российских и международных конференциях.

Замечания по автореферату:

1. Из автореферата не ясно, почему использованная модель расплавов носит название обобщенная и «регулярная» (в кавычках). На основании каких предпосылок автор предполагает соответствие расплавов изученных систем именно этой модели?
2. Каковы основные отличия данной модели от теории регулярных растворов В.А. Кожеурова и других имеющих практическое применение моделей регулярных растворов?
3. В табл. 1 (С.8 автореферата) приведены уравнения зависимости изменения энергии Гиббса реакций от температуры. Указывается, что это рассчитанные значения. Не ясно, это рассчитано с помощью предлагаемой модели или по стандартной методике. Если первое, то в чем отличия и насколько?

Анализ содержания автореферата, публикаций автора, свидетельствуют о том, что соискателем выполнен большой объем физико-химических исследований, подкрепленный сопоставимостью разработанной модели с экспериментальными данными по изученной системе. Можно заключить, что диссертация Працковой Светланы Евгеньевны «Моделирование термодинамических свойств расплавов системы Na^+ , Ca^{2+} , Al^{3+} // O^{2-} , F^- » удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям в «Положении о порядке присуждения ученых степеней», утвержденном постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия».

Доктор технических наук, профессор
кафедры «Физическая химия и
технологии микросистемной
техники» ФГБОУ ВПО «Санкт-
Петербургский государственный
политехнический университет»



Липин Вадим Аполлонович



ФИО: Липин Вадим Аполлонович

Почтовый адрес: 195251, Россия, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

Телефон: (812) 552 – 77 – 67

e-mail: vadim.lipin@km.ru