

Утверждаю

Директор ФГБУН «Институт металлургии»

УрО РАН

д.т.н. Е.Н. Селиванов

2014 г.



### ОФИЦИАЛЬНЫЙ ОТЗЫВ

ведущей организации – Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института металлургии Уральского отделения РАН на диссертационную работу Працковой Светланы Евгеньевны **«Моделирование термодинамических свойств расплавов системы  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Al}^{3+}$  //  $\text{O}^{2-}$ ,  $\text{F}^-$ »**, представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия

Актуальность темы. Актуальность работы определяют в первую очередь выбранные для исследования системы. Так система  $\text{NaF} - \text{AlF}_3 - \text{Al}_2\text{O}_3$  представляет основу электролита алюминиевых электролизеров. Окисно-фторидные расплавы системы  $\text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{CaF}_2$  составляют основу «ковшовой металлургии», представляющей собой обработку металла в печах-ковшах шлаковыми смесями. Интенсивность взаимодействия металла и синтетического шлака во многом зависит от химического и фазового состава и термодинамических свойств исследуемых окисно-фторидных систем.

Научная новизна. Впервые оценены энтальпийные и энтропийные составляющие функций смешения и избыточных функций окисно-фторидных расплавов шестикомпонентной взаимной системы  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Al}^{3+}$

//  $O^{2-}$ ,  $F^-$ . Показано, что в рамках неидеальной ионной модели шлаков обобщенная модель «регулярных» ионных растворов легко трансформируется для описания термодинамических свойств расплавов с произвольным числом катионов и анионов. Впервые построены диаграммы состояния ряда сечений шестикомпонентной взаимной системы и тройная диаграмма состояния  $CaO - CaF_2 - CaS$ .

Практическая ценность работы. Результаты моделирования термодинамических свойств расплавов системы  $Na^+$ ,  $Ca^{2+}$ ,  $Al^{3+}$  //  $O^{2-}$ ,  $F^-$  носят справочный характер. Полученные термодинамические уравнения могут быть рекомендованы для оценки эффективности процессов десульфурации с помощью оксидно-фторидных шлаков при выпечной обработке стали, а также для оптимизации составов и свойств «криолитных» солевых расплавов.

Достоверность результатов диссертации обеспечивается использованием современных аттестованных программных и вычислительных средств, тщательным подбором параметров моделирования, ясным физическим смыслом установленных результатов моделирования с экспериментальными литературными данными.

Наиболее существенными результатами, на наш взгляд, являются:

- результаты термодинамического моделирования диаграмм состояния двойных и тройных сечений шестерной взаимной системы  $Na^+$ ,  $Ca^{2+}$ ,  $Al^{3+}$  //  $O^{2-}$ ,  $F^-$ ;
  - рассчитанные функции смешения и избыточные функции оксидно-фторидных расплавов;
  - теоретический вывод о максимальной десульфурующей способности синтетического шлака системы  $CaO - CaF_2$ .
-

Замечания по диссертационной работе:

1. Отмечается недостаточная полнота обзора имеющихся в литературе термодинамических данных по проблеме исследования.
2. Недостаточный сравнительный анализ различных методов моделирования термодинамических свойств исследуемых оксидно-фторидных систем.
3. В табл. 1 (стр. 51) термодинамических характеристик чистых компонентов приводятся справочные данные для  $\alpha$  -,  $\beta$  - и  $\gamma$  -  $\text{Na}_2\text{O}$ ,  $\alpha$  -  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , но нет данных по  $\gamma$  -  $\text{Al}_2\text{O}_3$ .
4. В диссертации отсутствуют выводы по отдельным главам.
5. В диссертации используются мольные, массовые (весовые) проценты компонентов, а иногда и без указания их способов выражения, что может приводить к путанице.

Заключение. Высказанные замечания не снижают теоретическую и практическую ценность диссертационной работы С.Е. Працковой, выполненной на высоком научном уровне. Её результаты апробированы на 13 Международных и Российских научных конференциях и семинарах. Авторский список публикаций по теме исследования включает 18 наименований, в том числе 4 статьи в журналах из списка ВАК. Автореферат соответствует содержанию диссертации.

Результаты диссертационной работы могут представлять интерес для широкого круга организаций и учреждений, занимающихся вопросами теории металлургических процессов. К ним можно отнести Институт металлургии УрО РАН, ИМЕТ им. А.А. Байкова, ЦНИИ Чермет, МИСиС, УрФУ им. Б.Н. Ельцин, ЮУрГУ (НИУ) и др.

Характеризуя диссертацию в целом, следует отметить, что она представляет законченную научно-квалификационную работу, содержащую решение важных теоретических задач и соответствует специальности 02.00.04 – физическая химия.

---

По своему объёму, актуальности, научной новизне и практической значимости полученных результатов диссертационная работа Працковой Светланы Евгеньевны «Моделирование термодинамических свойств расплавов системы  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Al}^{3+}$  //  $\text{O}^{2-}$ ,  $\text{F}^-$  отвечает требованиям «Положения о порядке присуждения учёных степеней», утвержденном постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 г (пункты 9 – 14), а её автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Диссертационная работа рассмотрена на расширенном научном семинаре лаборатории физической химии металлургических расплавов, электротермии восстановительных процессов, аналитической химии.

Протокол № 12 от 25 ноября 2014 г.

Отзыв утвержден на Ученом совете ИМЕТ УрО РАН, протокол № 11 от 3 декабря 2014 г.

Председатель научного семинара,  
главный научный сотрудник,  
д.т.н., профессор



С.А. Истомирин