

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.340.04,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
АВТОНОМНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО
ОБРАЗОВАНИЯ «НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
НИЖЕГОРОДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. Н.И.
ЛОБАЧЕВСКОГО», ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ
СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 27.10.2022, протокол заседания № 25

О присуждении Балугеой Крстине Вадимовне, гргданке Россйской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Термодинамика висмутсодержащих халькогенидных и теллуридных стекол для волоконной оптики», в виде рукописи, по специальности 1.4.4 – Физическая химия (химические науки) принята к защите (протокол заседания № 14) диссертационным советом 24.2.340.04, созданным на базе ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского» по адресу: 603022, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, д. 23, приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации №561/нк от 03.06.2021.

Соискатель – Балугева Кристина Вадимовна, 16 февраля 1993 года рождения.

В 2017 соискатель окончила Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского». С 2017 года по 2022 год обучалась в очной аспирантуре

Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девярых РАН» (ИХВВ РАН). В настоящее время соискатель работает в должности младшего научного сотрудника в лаборатории аналитической химии высокочистых веществ ИХВВ РАН.

Диссертация выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки «Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девярых РАН».

Научный руководитель – доктор химических наук, **Кутын Александр Михайлович**, ведущий научный сотрудник лаборатории аналитической химии высокочистых веществ Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девярых РАН».

Официальные оппоненты:

Тверьянович Юрий Станиславович, доктор химических наук, профессор, заведующий кафедрой лазерной химии и лазерного материаловедения Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет»,

Федосеев Виктор Борисович, доктор химических наук, профессор, ведущий научный сотрудник лаборатории фотополимеризации и полимерных материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН»

дали **положительные отзывы на диссертацию.**

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», г. Москва, в своем положительном отзыве, подписанном **Петровой Ольгой Борисовной**, д.х.н., доцентом, профессором кафедры химии и технологии кристаллов указала,

что диссертационная работа Балугевоу Крисуны Вадимовны «Термодинамика висмутсодержащих халькогенидных и теллуридных стекол для волоконной оптики» является законченной научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований содержится решение научной задачи по разработке термодинамических основ высокочистых халькогенидных Ge-S-Bi и теллуридных TeO₂-WO₃-Bi₂O₃ стекол, что имеет существенное значение для развития химии и технологии неорганических ИК-материалов. По своей актуальности, уровню проведенных исследований, научной и практической значимости, степени обоснованности научных положений и выводов и достоверности результатов диссертационная работа Балугевоу Крисуны Вадимовны полностью соответствует всем требованиям, установленным пп. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней» к кандидатским диссертациям, а ее автор, Балугева Кристина Вадимовна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.4 Физическая химия.

Соискатель имеет 40 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 19 работ, из них в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией и входящих в международные базы данных Scopus, опубликовано 4 статьи, 15 работ опубликовано в сборниках статей и материалов международных и всероссийских конференций. Недостоверные сведения об опубликованных работах в диссертации отсутствуют. Общий объем опубликованных по теме диссертации научных работ составляет 44 страницы. Авторский вклад соискателя составляет 70 %.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Kut'in A.M., Plekhovich A.D., **Balueva K.V.**, Sukhanov M.V., Skripachev I.V. Standard thermodynamic functions of GeS_x:Bi (1 < x < 2) glasses // Journal of Non-Crystalline Solids. – 2019. – V. 509. – P. 74–79.

2. Кутьин А.М., Плехович А.Д., Суханов М.В., **Балуева К.В.** Исследование кристаллизационной устойчивости оптически активных стекол $\text{GeS}_x\langle\text{Bi}\rangle$ // Неорганические материалы. – 2019. – Т. 55, № 10. – С. 1101–1107.
3. **Balueva K.V.**, Kut'in A.M., Plekhovich A.D., Motorin S.E., Dorofeev V.V. Thermophysical characterization of $\text{TeO}_2\text{-WO}_3\text{-Bi}_2\text{O}_3$ glasses for optical applications // Journal of Non-Crystalline Solids. – 2021. – V. 553. – P. 120465.
4. **Балуева К.В.**, Плехович А.Д., Кутьин А.М., Суханов М.В. Термодинамический анализ кристаллизационной устойчивости стекол Ge-S-Bi // Журнал неорганической химии. – 2021. – Т. 66, № 8. – С. 1046–1053.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

Тверьяновича Юрия Станиславовича, доктора химических наук, профессора, заведующего кафедрой лазерной химии и лазерного материаловедения Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет», официального оппонента.

В качестве замечаний отмечено следующее:

- 1) Построение диссертации несколько нетрадиционно.
 - а) Диссертация посвящена, как следует из названия, термодинамике висмутсодержащих стекол. Более того, в автореферате указано: «**Цель работы** Разработка методик термодинамической характеристики стеклообразующих систем ...» Литературный же обзор содержит информацию о применении и эксплуатационных свойствах этих материалов. В то время как в нем следовало изложить и проанализировать основные концепции термодинамического описания стеклообразных материалов, используемые в научной литературе. Таким образом, в диссертационной работе фактически отсутствует литературный обзор предмета исследования.
 - б) Описание синтеза стекол находится в результатах и их обсуждении, а не в экспериментальной части, содержащей описание остальных методик.

2) Из сравнения результатов исследования теллуритных и халькогенидных стекол складывается впечатление, что они гораздо лучше проработаны для первых из них.

а) Табл. 3.1 и рис. 3.2. Почему величина скачка теплоемкости $\Delta C_p^\circ(T_g)$, Дж/(моль·К) для стекла $\text{GeS}_{1.60}\text{Bi}_{0.02}$ отличается от остальных стекол в 2 раза в то время как его состав отличается от другого стекла всего на 13%, а все параметры статистической модели (табл. 3.2) плавно зависят от состава? Почему на рис. 3.2 отсутствуют экспериментальные данные, которые позволили автору в табл. 3.1 указать экспериментальную величину ΔC_p° для стекла $\text{GeS}_{1.25}\text{Bi}_{0.02}$ (95.1 ± 2.7) Дж/(моль·К)? Если тем не менее она действительно такова, то это означает, что величина ($C' - C''$) для этого стекла в разы больше, чем для остальных стекол. Автор справедливо отмечает, что этот параметр определяется температурными режимами получения стекла и проведения измерений. Но эти режимы одинаковы для всех стекол. В этом отношении аналогичный рисунок (3.13) для теллуритных стекол выглядит абсолютно правильным (значения и C' и C'' для всех стекол имеют соизмеримые величины).

б) Рис. 3.4. Согласно физике твердого тела температурная зависимость КТР с точностью до постоянного множителя повторяет температурную зависимость C_p . Следовательно, в области низких температур зависимость описывается кубической по температуре функцией, которая при повышении температуры переходит в функцию с плавно уменьшающейся производной по температуре. С чем связана близость температурной зависимости к линейной в данном случае? В то же время аналогичный график (3.15) для теллуритных стекол абсолютно корректен.

в) При описании структуры стекол и переохлажденных стеклообразующих расплавов в литературе используется представление о структурных единицах. Именно они являются элементарными единицами структуры стекла, а не отдельные атомы. В этом отношении набор компонентов, используемых в диссертации для описания теллуритных стекол вполне

понятен. Это оксиды, каждому из которых можно сопоставить структурную единицу. В случае халькогенидных стекол абсолютно не ясно, что автор понимает под такими компонентами, как Bi или Ge и зависимость их доли от температуры (см. рис. 3.5).

3) Стр. 46, уравнение (2.21) в левой части стоит мольный объем, а одно из слагаемых правой части в диссертации определено как «изменения температуры, связанные с коллективными степенями свободы для стекла» Соблюдается ли при этом идентичность размерности обеих частей уравнения?

4) На стр. 47. непонятно сформулирована следующая фраза: «Принято считать, что кристаллизационные процессы в стеклообразующих системах (СС) из состояния переохлажденного расплава обусловлены чисто кинетическими факторами, поскольку такое состояние является метастабильным. Однако на практике в 2-х и более компонентных СС кристаллизуются не все компоненты сразу, а наблюдается «покомпонентная» кристаллизация, т.е. выделение фазы с преобладающим по составу компонентом». Во-первых, почему обусловленность чисто кинетическим фактором противоречит последовательной кристаллизации различных фаз многокомпонентного стекла? Во-вторых, порядок выделения кристаллических фаз не связан с преобладанием компонентов в составе стекла. Так в халькогенидных стеклах, содержащих халькогениды 3-d переходных металлов даже в концентрации менее 1 мол.%, именно их соединения выделяются в первую очередь.

5) На стр. 70 читаем: «Рассчитанные значения стандартных энтальпий образования исследованных халькогенидных стекол из таблицы 3.9, которые хорошо соответствуют найденным из экспериментальных данных величинам (таблица 3.5), показывают тенденцию уменьшения энтальпии образования стекол, то есть возрастания их энергетической выгодности по мере увеличения содержания висмута в составе стекла.» Однако в обеих таблицах энергетическая выгодность образования стекол

$\text{GeS}_x\text{Bi}_{0.02}$ растёт при увеличении x , а значит при уменьшении атомной доли Bi.

Федосеева Виктора Борисовича, доктора химических наук, профессора, ведущего научного сотрудника лаборатории фотополимеризации и полимерных материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН», официального оппонента.

В качестве замечаний отмечено следующее:

1) В работе нет информации, подтверждающей характеристики исследуемых образцов (состав, состояние, однородность).

2) Как объясняется немонотонность зависимости плотности стекол от содержания серы в $\text{GeS}_x\text{Bi}_{0.02}$ (табл. 3.3): плотность состава $\text{GeS}_{1.35}\text{Bi}_{0.02}$ ниже, чем при более высоких и низких содержаниях серы.

– Связано ли это с особенностями данного состава или неточностью измерений (к сожалению, при описании пикнометрической методики не упомянуто число измерений для расчета погрешности, а в тексте не приведены экспериментальные данные).

– Влияет ли эта немонотонность на оценки термодинамических параметров, которые тоже меняются немонотонно.

3) В работе несколько раз упомянут метод нелинейной регрессии (напр. стр. 56 и 76), но не приведено само уравнение регрессии.

– О каких регрессионных зависимостях от состава стекла идёт речь в пункте 3.2 задач исследования и пункте 2 выводов диссертации.

– Уравнение регрессии, приведённое на рис. 3.3 для монотонно убывающих значений, прогнозирует существование минимума для величины h^* . Связано ли это с неудачным выбором уравнения регрессии (полином 2-го порядка) или отражает реальное свойство системы?

4) Так как термодинамические характеристики рассчитаны по экспериментальным данным, они должны наследовать и увеличивать их погрешность.

– Погрешность измерений плотности табл. 3.3 и 3.12 не позволяет увидеть различие плотности при температурах 20 и 75 °С, при этом расчет термодинамических параметров, опирающихся на экспериментальные значения, должен иметь подобную погрешность на рис. 3.4. и 3.15 соответственно.

– Зависимости плотности от температуры и содержания серы на рис.3.4 и 3.12 не проходят через экспериментальные точки, которые в пределах погрешности имеют равные значения (см. табл. 3.3 и 3.12). Как была выполнена экстраполяция "с использованием экспериментальных данных" на широкий интервал температур.

– Погрешность расчетных и литературных значений энтальпии, использованных для определения валентно-орбитальных характеристик достигает ~5% в табл. 3.6 и ~0.8% в табл. 3.15, поэтому результаты расчета заряда в табл. 3.7, 3.8 и 3.16, 3.17 должны иметь сопоставимую погрешность. При этом степень окисления висмута в стекле, приведённая в табл. 3.8 и 3.17, для разных составов неразличима. Превышает ли степень окисления висмута значение +3 (табл. 3.17)?

5) По расчётам равновесного состава.

– По существу работы не представляется необходимым обсуждать и моделировать состав газовой фазы равновесный стеклу, расплаву или твердому раствору (см. рис. 3.5, 3.6, и далее). При этом не имеет особого смысла утверждение "Энергия Гиббса сосуществующего с паром расплава определяется рассчитанным содержанием компонентов ассоциированного жидкого раствора и их химическими потенциалами" [С.49].

– Вызывает вопрос возможность существования и рост доли жидких компонентов Bi и GeS в равновесии с кристаллической фазой при низких (300-400 К) температурах на рис.3.6.

Наумова Владимира Ивановича, доктора химических наук, профессора, заведующего кафедрой «Производственная безопасность, экология и химия» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Нижегородский

государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева». По автореферату сделаны следующие замечания:

1. Чем обусловлен выбор компонентов в табл. 2 автореферата? Название таблицы, кстати, не вполне соответствует её содержанию.

2. В начале второго абзаца на стр. 20 автореферата термин «...методология...» следует заменить на более соответствующий – «...методика...», поскольку согласно выводам работы речь идет о разработке методики, которая «... позволит прогнозировать возможные продукты кристаллизации и определить температурный интервал их образования...»

Анашкиной Елены Александровны, доктора физико-математических наук, старшего научного сотрудника лаборатории экстремальной нелинейной оптики Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики РАН». По автореферату сделаны следующие замечания:

1. Чем обусловлен выбор температурного диапазона для термодинамических расчетов? (Табл.2)

2. На рис. 1б для теллуритного стекла не приведена расшифровка кристаллической фазы, хотя диссертантом это определено и далее в тексте эта информация есть.

Белова Глеба Витальевича, доктора технических наук, ведущего научного сотрудника лаборатории химической термодинамики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова». По автореферату сделаны следующие замечания:

1. Требуется пояснить, на чем основана возможность экстраполяции в частности волюметрических функций вплоть до 0 К.

2. Какие данные использовались при разработке термодинамических методик?

Кузьмичева Александра Георгиевича, кандидата технических наук, начальника лаборатории нанокерамики Акционерного общества «Научно-

производственное предприятие «Салют». По автореферату сделано следующее замечание:

- К сожалению, в автореферате не нашлось места хотя бы для краткой характеристики образцов по чистоте и способам их получения.

Аллахвердова Гранта Рантовича, доктора химических наук, профессора, заведующего лабораторией тонкого неорганического синтеза Федерального государственного унитарного предприятия «Институт химических реактивов и особо чистых химических веществ Национального исследовательского центра «Курчатовский институт». Отзыв замечаний и вопросов не содержит.

Школьников Евгений Васильевича, доктора химических наук, профессора, заслуженного работника высшей школы РФ, профессора кафедры химии Санкт-Петербургского государственного лесотехнического университета. По автореферату сделано следующее замечание:

- Термодинамические расчеты разности химических потенциалов жидких и кристаллических компонентов проведены с использованием для полимерных расплавов модели ассоциированных растворов, к тому же результаты экстраполируются на переохлажденное состояние и приводятся без указания погрешностей, которые могут быть соизмеримы с движущей силой кристаллизации $\Delta\mu$ (0.2-1 Дж/моль·атом для GeS и GeS₂, рис. 6), что затрудняет оценку вероятной последовательности кристаллизации фаз.

Жуковой Лии Васильевны, доктора технических наук, профессора, старшего научного сотрудника кафедры физической и коллоидной химии Химико-технологического института Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, и **Салимгареева Дмитрия Дарисовича**, кандидата технических наук, докторанта Химико-технологического института, доцента кафедры технологии стекла департамента Строительного материаловедения института Новых материалов и технологий Уральского федерального университета имени первого

Президента России Б.Н. Ельцина. По автореферату заданы следующие вопросы:

1. Были ли изготовлены волоконные световоды на основе стеклосодержащих систем Ge-S-Bi и $\text{TeO}_2\text{-WO}_3\text{-Bi}_2\text{O}_3$, или, планируете ли вы в дальнейшем получение заготовок и изготовление световодов на основе данных систем.

2. Кто синтезировал висмутсодержащие халькогенидные и теллуритные стекла?

Все отзывы положительные и во всех содержится рекомендация по присуждению Балуге Крестине Вадимовне ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия (химические науки).

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их компетентностью, достижениями в научных исследованиях по тематикам, близким с темой диссертации Балуге К.В., наличием у оппонентов и сотрудников ведущей организации публикаций в рецензируемых научных журналах и высоким профессиональным уровнем.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- **разработаны** методики определения стандартных термодинамических функций с возможностью их экстраполяции в низкотемпературную область до 0 К и исследования кристаллизационной устойчивости стекол на примере халькогенидной и теллуритной стеклообразующих систем;

- **предложен** подход к определению стандартных энтальпий образования ($\Delta_f H^\circ(298.15)$) стекол по принципу согласования полученной по калориметрическим измерениям энергии Гиббса с величиной для ассоциированного раствора (расплава), которые по литературным данным включают в себя компонентные значения $\Delta_f H^\circ(298.15)$;

- **доказана** перспективность предложенных методик для оптимизации по составу и условиям получения оптических стекол с требуемыми

характеристиками, что достигается применением квазичастичной теории к обработке эксперимента с предсказанием термодинамических свойств стекол при неисследованных температурах и составах на основе принципа параметрического подобия. Прогнозирование условий по составу и температурным режимам возможных кристаллизующихся компонентов в другой предложенной методике достигается адекватными задаче приемами термодинамического моделирования в рамках фундаментального метода минимизации энергии Гиббса;

- новых понятий и терминов не введено.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

- **доказана** на примере халькогенидной и теллуритной стеклообразующих систем применимость методов химической термодинамики к прогнозированию термических свойств оптических стекол в сочетании современного термоаналитического эксперимента с разработанной моделью обработки термодинамических данных для стеклообразующих систем;

применительно к проблематике диссертации результативно (эффективно, то есть с получением обладающих новизной результатов) использованы современные методы физико-химического анализа: дифференциальная сканирующая калориметрия; рентгенофазовый анализ; банки данных стандартных термодинамических функций, в частности, БД ИВТАНТЕРМО и др.; а также модель обработки термодинамических данных для стеклообразующих систем, выражения которой представлены в цитируемых по диссертации зарубежных и отечественных источниках; модель ассоциированных растворов Д.И.Менделеева, наиболее сочетаемая с оригинальной компьютерной версией метода минимизации энергии Гиббса;

- **изложены** результаты определения термодинамических характеристик халькогенидных и теллуритных стекол, являющихся справочной информацией, необходимой для технологических расчетов, а также сведения о кристаллизационной устойчивости стекол и возможных кристаллических

фазах в них, что важно при подборе оптимальных составов, условий синтеза, последующей термообработки и эксплуатации стекол;

- **раскрыты** особенности в характере поведения температурных зависимостей теплоемкостей для изученных рядов халькогенидных и теллуритных стекол;

- **изучено** термическое поведение халькогенидных Ge-S-Bi и теллуритных $\text{TeO}_2\text{-WO}_3\text{-Bi}_2\text{O}_3$ стекол с установлением условий и состава выделения кристаллических фаз, что определяет возможность применения указанных стекол в различных областях науки и техники;

- **проведена модернизация** существующей обработки измерений теплоемкости численным интегрированием с учетом характеристик переходов между состояниями путем использования теории стандартных термодинамических функций стеклообразующих систем, которая предоставляет возможность физически-обоснованного восполнения недостающих данных, включая низкотемпературные; существующих представлений об исключительно экспериментальном пути исследования кристаллизационной устойчивости стекол.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

- **разработаны и внедрены** методики определения термодинамических характеристик из калориметрического и волюметрического эксперимента и термодинамического исследования кристаллизационной устойчивости висмутсодержащих халькогенидных и теллуритных стекол; показано, что разработанные методики хорошо описывают известные экспериментальные результаты и могут быть использованы для прогнозирования термодинамических свойств других стеклообразующих систем;

- **определены** температурные зависимости калорических и волюметрических свойств изученных стекол, включая низкотемпературные данные;

- **создана** методика полной термодинамической характеристики стекол, включающая определение стандартных термодинамических функций, в том числе расчет стандартных энтальпий образования;

- **представлены** рекомендации по использованию разработанных методик для минимизации процесса кристаллизации в изученных халькогенидных и теллуритных стеклах, развивающие средства прогнозирования условий выделения кристаллических фаз в стекле, информация о которых может способствовать ускорению и совершенствованию технологии стекол и формированию из них новых, в частности, оптоволоконных систем.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

- **для экспериментальных работ** результаты и обоснованность выводов подтверждается использованием современного сертифицированного оборудования и взаимодополняющих методов исследования, обеспечивающих воспроизводимость и согласованность полученных результатов;

- **теория** построена на достоверных, проверяемых экспериментальных данных, на известных законах и положениях химической термодинамики, а результаты согласуются с опубликованными экспериментальными данными;

- **идея базируется** на анализе проблем и обобщении литературных данных в области химической термодинамики стекол;

- **использованы** современные источники информации по теме исследования, общепринятые способы изучения термических и структурных свойств;

- **установлено**, что полученные автором результаты исследования дополняют и расширяют сведения, имеющиеся в научной литературе;

- **использованы** современные приборы для физико-химического анализа оптических стекол.

Личный вклад соискателя состоит в подготовке литературного обзора по обозначенной теме работы, проведении экспериментальных

исследований, их обработке и анализе, а также в апробации результатов на конференциях и подготовке публикаций по итогам выполненной работы. Формулировка цели, постановка задач, разработка методик термодинамической характеристики стекол, обобщение полученных данных, формирование выводов проводились совместно с научным руководителем.

Диссертация охватывает основные вопросы поставленной научной задачи (проблемы) и соответствует критерию внутреннего единства, что подтверждается наличием обоснованного и целенаправленного плана исследований, формулировки цели работы и выводов на основании полученных результатов.

В ходе защиты диссертации были заданы вопросы и высказаны критические замечания относительно некорректного обозначения фундаментальной термодинамической величины, по которой делается вывод о возможности выделения кристаллической фазы в стеклах; отсутствия уравнения, связывающего калорические данные и рассчитанные по модели ассоциированного раствора и позволившего определить стандартные энтальпии образования стекол; нецелесообразности расчета зарядов на атомах путем представленной в работе модели валентно-орбитальной аппроксимации при наличии квантовохимических методов.

Соискатель Балужева К.В. согласилась с критическими замечаниями, ответила на задаваемые ей в ходе заседания вопросы и привела собственную аргументацию, указав, что несмотря на некорректное обозначение термодинамической величины полученные из проведенных расчетов результаты исследования кристаллизационной устойчивости стекол не вызывают сомнений и подтверждены экспериментально данными рентгенофазового анализа и дифференциальной сканирующей калориметрии, опубликованными в научных статьях высокорейтинговых журналов; отсутствие уравнения, возможно, затрудняет понимание методики определения стандартных энтальпий образования стекол, (но никак не влияет на результат, полученный в соответствии с общеизвестными

термодинамическими выражениями) однако представленные в презентации рисунки совместно с устным пояснением являются вполне достаточным и наглядным способом объяснения; расчет зарядов наряду со степенью окисления висмута по модели валентно-орбитальной аппроксимации выполнен в качестве дополнения к задаче определения стандартной энтальпии образования стекол, кроме того значения зарядов, полученных различными квантовохимическими методами, отличаются друг от друга, поэтому предложенный в диссертации способ также имеет право на существование.

На заседании 27 октября 2022 года диссертационный совет принял решение: за решение научной задачи, имеющей значение для развития соответствующей отрасли знаний – физической химии и технологии получения волоконных световодов, а именно за разработку методик термодинамической характеристики стекол, присудить **Балуевой К.В.** ученую степень кандидата химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 20 человек, из них 7 докторов наук (по специальности 1.4.4 – Физическая химия), участвовавших в заседании, из 22 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за 20, против 0, недействительных бюллетеней 0.

Председатель

диссертационного совета 24.2.340.04

д.х.н., профессор



Князев Александр Владимирович

Ученый секретарь

диссертационного совета 24.2.340.04

к.х.н.

Буланов Евгений Николаевич

27 октября 2022 г.