

Отзыв на автореферат диссертации

Давыдова Александра Георгиевича

«Влияние поляризационных взаимодействий на термодинамику жидкого состояния и ликвидус галогенидов щелочных металлов»,
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук
по специальности 1.4.4. Физическая химия

Термодинамическая теория возмущений используется для описания свойств расплавов галогенидов щелочных металлов. В качестве базовой системы принята модель заряженных твердых сфер с варьируемым диаметром, возмущением выступают дополнительные взаимодействия, обусловленные деформацией электронных оболочек ионов. Такой подход, как следует из автореферата, является авторской разработкой и требует обоснований, одним из которых могут служить результаты сопоставления рассчитанных в его рамках термодинамических свойств (теплоемкость, плотность и др.) расплавов с экспериментальными.

Ввиду высоких температур и агрессивности галогенидов щелочных металлов, сложности в постановке и проведении высокотемпературных измерений, экспериментальные данные имеют значительную погрешность. Предложенная модель также не может претендовать на полное отражение даже самых основных черт реальной системы. Поэтому апробацию модели следует проводить не по абсолютным значениям рассчитанных и измеренных величин, а на трендах в их изменении с изменением строения и состава, что и сделано в диссертации. Другие достоинства сформулированной модели – возможность анализа вкладов от учета различных межйонных эффектов.

Показано, что кулоновский заряд – дипольный, твердосферный вклады в приведенное давление и теплоемкость жидких галогенидов щелочных металлов – гладкие однозначные функции суммы и разности радиусов ионов. Это оказывается не всегда так для приведенной температуры плавления. Соли лития выпадают из этого тренда. В автореферате диссертации данный факт

констатируется, но нет каких-либо предположений, объяснений по этому поводу.

Диссертационное исследование по научной новизне, актуальности, публикациям в журналах, полностью отражающих ее содержание, соответствует критериям пп. 2.9 – 2.14 «Положения о присуждении ученых степеней» от 24 сентября 2013 г. № 842 (с поправками от 26 сентября 2022 г. № 1690), а автор работы, А.Г. Давыдов, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Доктор физико-математических наук, профессор, научный руководитель
Института теплофизики УрО РАН
Байдаков Владимир Георгиевич

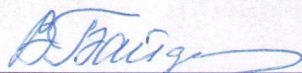
620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 107а

baidakov@itpuran.ru

+7 (343) 267 8801

21.11.2022

дата

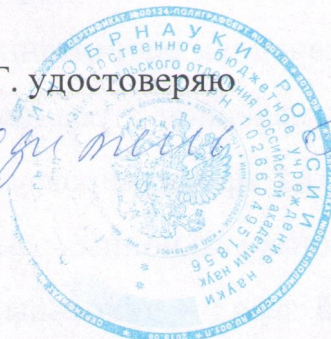


подпись

/ Байдаков В.Г.

Подпись Байдакова В.Г. удостоверяю

Демонструю



В.П. Волков