

## ОТЗЫВ

об автореферате диссертации Давыдова Александра Георгиевича «Влияние поляризационных взаимодействий на термодинамику жидкого состояния и ликвидус галогенидов щелочных металлов», представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

Описание физико-химических свойств расплавленных солей, основанное на квантово-механических представлениях для взаимодействия ионов в расплавах и методов статистической термодинамики, является перспективным направлением исследований. Применение термодинамической теории возмущений для задачи описания именно химико-термодинамических характеристик жидкофазных систем выглядит вполне логичным и обоснованным и ранее не было рассмотрено для жидко-солевых систем. Традиционные для физической химии задачи свойство-состав получают в этом случае весьма полезный для понимания инструмент. Такой подход разработан в диссертации Давыдова А.Г. для исследования различных термодинамических свойств расплавов: свободной энергии и энтальпии, теплоемкости и плотности. Оказалось, что обширный экспериментальный массив можно интерпретировать в терминах достаточно простых физических моделей, описываемых ионными радиусами и поляризуемостями. Несомненным плюсом является применение данной модели и к расчету положения ликвидуса. Отмечу, что в качестве объектов для исследования выбраны не отдельные соли или их смеси, а целый подкласс расплавов галогенидов щелочных металлов, благодаря чему исследование производит впечатление единообразной в смысле методологии работы. Рассмотрение всего подкласса ГЦМ в рамках предложенной модели позволило автору провести анализ роли различных вкладов в термодинамику расплавов при рассмотрении зависимости от их химического состава.

**Актуальность** решаемых автором задач, **научная новизна и достоверность** сделанных выводов сомнений не вызывают. **Практическая значимость** работы заключается в возможном применении разработанной модели для вычисления термодинамических характеристик и температур ликвидуса в более сложных расплавах солей, востребованных при разработке новых технологических процессов. В частности, предложенное уравнение состояния может быть использовано для анализа поведения плотности и ее влияния на другие термодинамические характеристики в широком диапазоне высоких температур, давлений и состава. Полученные выражения для поляризационной поправки в термодинамические характеристики могут быть востребованы и для прогнозирования указанных свойств в других жидких ионных системах. Автореферат написан последовательно и логично, и оставляет хорошее впечатление. Результаты работы довольно полно отражены в 6 статьях, в том числе

в рейтинговых журналах WoS/Scopus, а также в большом количестве тезисов конференций: Mendeleev Congress, RCCT и др.

По автореферату диссертации имеются следующие **вопросы и замечания**:

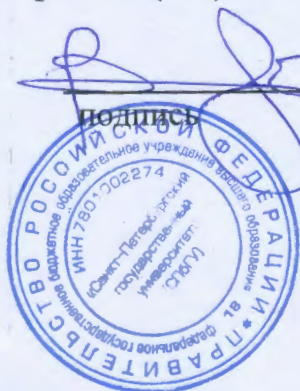
1. Кулоновский характер симметричной зависимости теплоемкости в зависимости от различий в радиусах катиона и аниона хорошо виден на рисунке 1 для фторидов щелочных металлов, однако из автореферата не ясно, почему эта кривая имеет минимум, а не максимум?
2. Для визуализации полученных и экспериментальных данных автор в большинстве случаев пользуется приведенными величинами. Например, при анализе теплоемкости, плотности, давления и температур плавления галогенидов щелочных металлов рассмотрены их безразмерные величины. Однако при обсуждении свободной энергии расплавов, автор почему-то проводит анализ лишь ее размерной величины в кДж/моль. Это выпадает из общей концепции работы.
3. Из рисунка 4 неочевидно, какая серия расчетов соответствует тому или иному варианту уравнения состояния. Логично было бы заменить надписи на рисунке  $\eta_{расч1.}$ ,  $\eta_{расч2.}$  ... другими, например:  $\eta_{расч. (УС 1)}$ ,  $\eta_{расч. (УС 2)}$ .

Указанные замечания не снижают высокой оценки работы. Диссертационная работа Давыдова А.Г. полностью соответствует паспорту специальности 1.4.4. Физическая химия, отвечает критериям Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ 24 сентября 2013 г. № 842 с изменениями от 26 сентября 2022 г. № 1690, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук. **Автор диссертационной работы, Давыдов Александр Георгиевич, заслуживает присуждения искомой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.**

доктор химических наук, профессор,  
профессор кафедры физической химии  
с возложенными обязанностями заведующего кафедрой  
ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет»,  
198504, г. Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский пр., д. 26  
E-mail: [a.viktorov@spbu.ru](mailto:a.viktorov@spbu.ru), Телефон: +7 (921) 301-11-78

10 ноября 2022  
дата

/ Викторов Алексей Исмаилович



Текст документа размещен  
в открытом доступе 2  
на сайте СПбГУ по адресу  
<http://spbu.ru/science/expert.htm>

Личную подпись  
А.И. Викторова  
заверяю  
И.О. начальника отдела кадров Мез  
И.И. Константинова  
10.11.2022