

## 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

Расплавы галогенидов щелочных металлов незаменимы во многих промышленных электрохимических процессах в качестве сред, например, при переработке отходов ядерного цикла, разделения и получения РЗЭ необходимых для материалов для техники и электроники. Данные расплавы также перспективны для использования в гелиоэнергетике, в качестве основных компонентов теплоносителей и тепловых резервуаров. Гигантский объём накопленных данных о свойствах расплавов галогенидов щелочных металлов до сих пор нуждается в должной теоретической интерпретации, а подчас и ревизии, а также служит уникальной базой для дальнейшего развития и параметризации новых расчётных методов. Несмотря на широкое распространение в последние годы прямого атомистического моделирования, физико-химический анализ сложных систем остаётся востребованным, поскольку его использование не ограничивается размерами моделей, а также способно дать наиболее полное термодинамическое описание свойств.

С этой точки зрения диссертационная работа Давыдова Александра Георгиевича является чрезвычайно актуальной и развивает статистическую теорию ионных расплавов как систем заряженных твердых сфер в варианте термодинамической теории возмущений. Автор вводит в статистическую теорию ионных расплавов учёт межчастичных взаимодействий типа ион-индуцированный диполь, что представляется перспективным для более корректного описания этих систем. Действительно, расчётные термодинамические свойства и функции, полученные автором в дальнейшем, обнаруживаются в наилучшем количественном согласии с экспериментальными данными. На основе предложенной теории удаётся понять изменения в плотности, теплоемкости и других свойствах жидких галогенидов щелочных металлов, как функции размеров и поляризуемостей ионов, становится возможным проанализировать термодинамические пути построения уравнений состояния в зависимости от давления, температуры и других условий.

Работа и результаты, представленные в автореферате, производят хорошее впечатление. При ознакомлении с авторефератом возник ряд вопросов и замечаний:

1) Пункт 3 в разделе «Научная новизна и практическая значимость» (о зависимости теплоёмкости расплавов ГЩМ от различия в размерах катионов и анионов), видимо, не детализирован в должной мере. Насколько мне известно, свойства таких расплавов и ранее пытались представить как функцию разности ионных радиусов.



