

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 РЭ 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 удается 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.

- 2) На рис. 6 упоминается некое FactSage, происхождение и значимость которого мне неясны.
- 3) В работе встречены такие словосочетания как «электростатика межионного взаимодействия» (с. 4), «квантовое компьютерное моделирование» (с. 10), которые мне представляются жаргонными.
- 4) Автор представлял ионы как твердые сферы и использовал парные потенциалы взаимодействия, учитывающие поляризацию ионов, как полиномиальные функции от $1/R$. Насколько трудоёмким было бы использование т.н. «оболочечной модели» для описания поляризуемости, когда каждый ион разделяется на две частицы - положительно заряженное точечное «ядро» и отрицательно заряженную «оболочку», центры масс которых соединены гармоническим потенциалом? Возможно, в будущем было бы интересно сравнить возможности и «оболочечной модели» для описания свойств термодинамических функций в рамках статистической теории расплавов.
- 5) Насколько применима разработанная теория учёта поляризационных взаимодействий и использовавшийся парный потенциал для описания термодинамических свойств расплавов галогенидов d-металлов?

Перечисленные замечания к автореферату не подвергают сомнению достоверность полученных результатов и развития теории. Личный вклад автора не вызывают сомнений. Результаты представлены автором на большом количестве международных и российских конференций и опубликованы в 6 статьях в профильных журналах, входящих в признанные ВАК российские и международные базы публикаций. Считаю, что по своей актуальности, новизне, научной и практической значимости работа Давыдова Александра Георгиевича «Влияние поляризационных взаимодействий на термодинамику жидкого состояния и ликвидус галогенидов щелочных металлов» полностью соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор достоин присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Ведущий научный сотрудник Лаборатории квантовой химии и спектроскопии,
Института химии твердого тела Уральского отделения РАН,
к.х.н., 02.00.04 – Физическая химия
ул. Первомайская, 91, 620108 г. Екатеринбург, Россия
тел. +7 343 3745331, enyashin@ihim.uran.ru

Еняшин Андрей Николаевич

Подпись Еняшина А.Н. заверяю.

Ученый секретарь

Института химии твердого тела УрО РАН

Богданова Екатерина Анатольевна

15.11.2022

