

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.

Развитие теории расплавленных солей является важной задачей современной науки, поскольку к настоящему времени накоплены большие массивы экспериментальных данных, которые до сих пор не получили систематического описания. Отмечу, что в последние десятилетия много внимания уделялось развитию расчетных методов: квантовая и классическая молекулярная динамика, однако в меньшей степени предлагались и формулировались модели, способные описать те или иные термодинамические свойства. Если добавить новый всплеск интереса к термодинамике галогенидов щелочных металлов в связи с жидкосолевыми атомными реакторами, то в этом смысле исследование А.Г. Давыдова представляется весьма актуальным.

Целью работы Давыдова Александра Георгиевича являлось количественное описание зависимостей «свойство-состав» для свободной энергии Гиббса, энтальпии, теплоемкости, плотности, а также температур плавления ГЦМ. Для достижения цели автором был разработан вариант термодинамической теории возмущений, основанный на модели заряженных твердых сфер различающихся диаметров с добавкой за счет поляризационных взаимодействий. Работа производит впечатление весьма единообразной, и это ее несомненный плюс, так как все рассмотренные далее свойства выводятся из свободной энергии.

В качестве вопросов и замечаний, которые не умаляют положительного впечатления о работе, можно отметить следующее:

1. При анализе температур плавления в пятой главе основное рассуждение ведется от кулоновской энергии расплава и кристалла ГЦМ. При этом не обсуждается большой скачок объема, имеющий место в этих солях при плавлении и связанный с этим вклад в энтропию плавления, которые, очевидно, должны меняться от состава.
2. Седьмой вывод о величине погрешностей при расчете кривых ликвидус требует дальнейшего уточнения и корректировки предложенного подхода, так как величина порядка 100 градусов, очевидно, слишком велика. В частности, почему более точная экспериментальная

плотность привела к худшему согласию с экспериментом по температуре плавления на рисунке 6?

Отмеченные замечания не затрагивают ценности полученных результатов. Работа выполнена на хорошем научном уровне. Автореферат диссертации и публикации в полной мере отражают содержание работы. Статьи по теме диссертационной работы опубликованы в профильных высокорейтинговых журналах, таких как J. Phys. Chem., J. Mol. Liq. и др.

В целом диссертация отвечает требованиям п.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (в редакции постановления Правительства Российской Федерации от 24.09.13 № 842 с изменениями от 26 сентября 2022 г. № 1690), предъявляемых к кандидатским диссертациям, а Давыдов Александр Георгиевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Кузнецов Сергей Александрович,
доктор химических наук,
директор института, заведующий Лабораторией высокотемпературной химии и электрохимии Института химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В. Тананаева.

Мурманская обл., 184209, г. Апатиты, Академгородок, 26А,

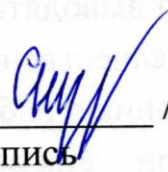
Эл. почта: s.kuznetsov@ksc.ru

Тел.: (81555) 79730

Я, Кузнецов Сергей Александрович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

11.11.2022

дата



подпись

/ Кузнецов С.А.

Стулов Юрий Вячеславович,

кандидат химических наук,

старший научный сотрудник Лаборатории высокотемпературной химии и электрохимии Института химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В. Тананаева.

Мурманская обл., 184209, г. Апатиты, Академгородок, 26А,

Эл. почта: iu.stulov@ksc.ru

Тел.: (81555) 79107

