

Отзыв на автореферат диссертации

Давыдова Александра Георгиевича

«Влияние поляризационных взаимодействий на термодинамику жидкого состояния и ликвидус галогенидов щелочных металлов»

на соискание ученой степени кандидата химических наук

по специальности 1.4.4. Физическая химия

Работа А.Г. Давыдова посвящена статистико-термодинамическому описанию характеристик расплавленных галогенидов щелочных металлов. Несмотря на большой объем экспериментального материала, который накоплен и используется в настоящее время в справочной литературе, многие общие вопросы о типичных зависимостях состав-свойство не получили теоретической интерпретации. Физико-химический подход к выделению параметров межчастичного взаимодействия, отвечающих за изменения различных свойств с вариациями состава, до сих пор является актуальным и нужным для развития теории расплавленных солей. Вариант термодинамической теории возмущений с базисом в виде модели заряженных твердых сфер для учета взаимодействий типа ион-индуцированный диполь представляется достаточно новым и перспективным. Можно приветствовать и единообразие данного метода во всех разделах кандидатской диссертации А.Г. Давыдова. В результате диссертанту удалось провести расчеты и проанализировать значительное многообразие термодинамических свойств: от свободной энергии Гиббса и энтальпии к теплоемкости, плотности и давлению. Отмечу раздел о температурах плавления и линии ликвидус в эвтектических смесях галогенидов щелочных металлов, где была привлечена упрощенная модель ионного кристалла для описания равновесий жидкость – твердое тело. Диссертант, несомненно, провел большую работу по поиску и сопоставлению экспериментальных данных с представленными теоретическими разработками. В частности, предложена функциональная зависимость теплоемкостей жидких галогенидов щелочных металлов от ионных радиусов и поляризуемостей. Проанализированы различные термодинамические пути построения уравнения состояния, описывающего изменения плотности щелочно-галогидных расплавов при различных давлениях и температурах.

К замечаниям по автореферату можно отнести следующее:

1) Явные корреляции температур плавления в зависимости от отношения радиусов катиона и аниона отмечались еще в работах Полинга. В работах Kanno, 1968, Nature, v. 218, p. 866 отмечалась важная роль поляризуемостей

при изменении характеристик плавления. Однако, данный автор сгруппировал соли в подсемейства с общим катионом. Мне представляется, что предлагаемый подход позволяет провести расширенный анализ температур плавления также и от поляризуемостей.

2) Не слишком обсуждаются в автореферате пределы применимости упрощенного рассмотрения диэлектрических свойств по Клаузиусу-Мосотти. До какой степени экспериментальные данные о показателе преломления могут не соответствовать картине локального распределения диэлектрической проницаемости на микроскопических масштабах вблизи иона?

Отмеченные замечания и недостатки не влияют на общую положительную оценку работы. Проведенное исследование по научной новизне и актуальности, публикациям в журналах, апробации на международных научных конференциях полностью соответствует критериям, определенным в 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.

Научный сотрудник Лаборатории квантовой химии и спектроскопии,
Института химии твердого тела Уральского отделения РАН,

к.х.н., 1.4.4. Физическая химия

Попов Илья Сергеевич

ул. Первомайская, 91, 620108 г. Екатеринбург, Россия
тел. +7 343 3745331, popov@ihim.uran.ru

Попов

Подпись Попова И.С. заверяю.

Ученый секретарь

Института химии твердого тела УрО РАН,
к.х.н. Богданова Екатерина Анатольевна

Богданова

15.11.2022

