

ПРОТОКОЛ № 12

заседания диссертационного совета Д 24.1.045.01
при Институте высокотемпературной электрохимии УрО РАН

от 22 сентября 2022 г.

ПРИСУТСТВОВАЛИ: д. хим.наук, профессор Степанов Виктор Петрович, к. хим.наук Кулик Нина Павловна, д. хим.наук Архипов Павел Александрович, д. хим.наук Бронин Димитрий Игоревич, д. физ.-мат.наук Галашев Александр Евгеньевич, д. хим.наук Дунюшкина Лилия Адиевна, д. хим.наук Елшина Людмила Августовна, д. хим.наук, доцент Закирьянова Ирина Дмитриевна, д. хим.наук Курумчин Эдхем Хурьятбекович, д. хим.наук Медведев Дмитрий Андреевич, д. хим.наук, профессор РАН Новоселова Алена Владимировна, д. хим.наук, профессор Останина Татьяна Николаевна, д. техн.наук, доцент Потапов Алексей Михайлович, д. хим.наук, профессор Рудой Валентин Михайлович, д. хим.наук Смоленский Валерий Владимирович, д. хим.наук, доцент Тарасова Наталия Александровна, д. хим.наук Ткачев Николай Константинович, д. хим.наук Ткачева Ольга Юрьевна, д. хим.наук Филатов Евгений Сергеевич, д. хим.наук, профессор Хохлов Владимир Антонович – всего 20 человек из 27 членов совета.

СЛУШАЛИ: председателя комиссии диссертационного совета Галашева А.Е. о диссертационной работе Давыдова Александра Георгиевича на тему «Влияние поляризационных взаимодействий на термодинамику жидкого состояния и ликвидус галогенидов щелочных металлов», представленной в диссертационный совет Д 24.1.045.01 базе Института высокотемпературной электрохимии УрО РАН на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия. Руководитель – доктор химических наук Ткачев Николай Константинович.

Комиссия в составе членов диссертационного совета Хохлова В.А., Потапова А.М., Галашева А.Е., считает:

1. Диссертация соответствует профилю совета, паспорту и отрасли заявленной специальности 1.4.4. Физическая химия. В работе предложена статистико-термодинамическая модель, позволяющая учесть поляризационные взаимодействия между ионами в расплавленных солях при использовании в качестве системы сравнения модели заряженных твердых сфер. На этой основе проведен теоретический анализ комплекса физико-химических свойств всех 20 расплавов галогенидов щелочных металлов: свободной энергии, энтальпии, теплоемкости, плотности и температур плавления. Направления проведенного исследования соответствуют следующим пунктам паспорта специальности: п.2 «Расчет термодинамических функций», «Изучение термодинамических аспектов фазовых превращений и фазовых переходов» галогенидов щелочных металлов и их смесей, п.4 «Теория растворов, межмолекулярные и межчастичные взаимодействия. Компьютерное моделирование строения и свойств молекул и их комплексов» в расплавах, «а также ранних стадий процессов растворения и зародышеобразования»; п.10 «Создание и разработка методов компьютерного моделирования строения и механизмов превращений химических соединений на основе статистических методов, включая методы молекулярной динамики, а также подходов типа структура-свойства».

2. Личный вклад автора состоит в подборе и изучении литературных данных, выводе формул в рамках термодинамической теории возмущений, написании расчетных программ, проведении расчетов термодинамических характеристик и фазовых равновесий, а также обработке полученных результатов и подготовке публикаций. Постановка целей и задач

исследования, анализ и обсуждение результатов расчетов проводились научным руководителем д.х.н. Н.К. Ткачевым и автором совместно.

3. Аprobация полученных результатов состоялась на 10 международных конференциях

4. Основные результаты диссертационной работы достаточно полно представлены в 6 статьях в рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК, и в 20 тезисах докладов международных конференций.

6. Текст диссертации представляет собой самостоятельную научно-квалификационную работу, не содержит заимствованного материала без ссылки на автора и (или) источник заимствования. Степень оригинальности текста диссертации, определенная с помощью системы «Руконтекст», составила 94.61%. При этом 3.7% заимствований приходятся на размещенные в сети Интернет собственные работы автора. Остальные 1.7% заимствований составляют часто употребляемые во введениях диссертаций формулировки и термины, а также устоявшиеся выражения. Результаты проверки оригинальности текста представлены по ссылке: <http://text.rucont.ru/History/ReviewItem?h=A5B4028ED724554F3F17543D25F195E3>.

6. Результаты работы обладают научной новизной и практической значимостью. Диссертация удовлетворяет требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (Постановление правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842 с изменениями на 11.09.2021) и может быть представлена к защите в нашем совете.

В качестве ведущей организации рекомендуется и рекомендуется ФГБУН «Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН». Область интересов сотрудников Института, в частности лаборатории структуры и динамики молекулярных и ион-молекулярных растворов, включает всестороннее изучение физико-химических свойств ионных и ион-молекулярных жидкостей, а также характера межчастичных взаимодействий в них с помощью как экспериментальных методов исследования, так и методов статистической теории жидкости, квантовой химии и молекулярного моделирования. Список публикаций сотрудников ведущей организации, наиболее близко относящихся к теме диссертационной работы:

1. Будков Ю.А. Теория самосогласованного поля в химической термодинамике ион-молекулярных систем / Ю.А. Будков. – Москва: Ленанд, 2020. – 248 с.

2. Груздев М.С. Основные синтетические методы получения ионных жидкостей. Ионные жидкости: Теория и практика / М.С. Груздев, А.М. Колкер. – Иваново: Ивановский издательский дом, 2019. – 672 с.

3. Budkov Y.A. Statistical theory of fluids with a complex electric structure: Application to solutions of soft-core dipolar particles / Y.A. Budkov // Fluid Phase Equilibria. – 2019.– V. 490.– P. 133–140.

4. Budkov Y.A. Two-component electrolyte solutions with dipolar cations on a charged electrode: Theory and computer simulations / Y.A.Budkov,A.V. Sergeev,S.V. Zavarzin, A.L. Kolesnikov // The Journal of Physical Chemistry C. – 2020. – V. 124. – P. 16308–16314.

5. Kustov A.V. The energetics of solvation and ion-ion interactions in propidium chloride aqueous solutions / A.V.Kustov,O.A. Antonova,N.L. Smirnova,A.A. Kladiev,T.V. Kudayarova, M.S.Gruzdev, D.B. Berezin// Journal of Molecular Liquids.– 2018.– V. 263.– P. 49–52.

6. Shmukler L.E. Triethylammonium-based protic ionic liquids with sulfonic acids: Phase behavior and electrochemistry / L.E.Shmukler,M.S. Gruzdev,N.O. Kudryakova,Y.A. Fadeeva, A.M.Kolker, L.P. Safonova // Journal of Molecular Liquids. –2018. –V. 266. –P. 139–146.

7. Fedorova I.V. Ab initio study of structural features and H-bonding in alkylammonium-based protic ionic liquids / I.V.Fedorova,M.A. Krestyaninov, L.P. Safonova // The Journal of Physical Chemistry A. –2017. –V. 121. –P. 7675–7683.

Согласие предлагаемой ведущей организации получено.

В качестве официальных оппонентов рекомендуются:

Кондратюк Игорь Мирославович, доктор химических наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия», профессор кафедры общей и неорганической химии ФГБОУ ВО Самарского государственного технического университета. Область научных интересов – теоретическое и экспериментальное исследование термодинамических свойств и фазовых равновесий в многокомпонентных смесях галогенидов щелочных и щелочноземельных металлов. Список публикаций, наиболее близких к теме диссертационной работы:

1. Burchakov A.V. Stable tetrahedron $\text{LiF-KI-K}_2\text{CrO}_4\text{-Li}_2\text{CrO}_4$ of the quaternary reciprocal system $\text{Li, K} \parallel \text{F, I, CrO}_4$ / A.V. Burchakov, E.M. Dvoryanova, **I.M. Kondratyuk**, Y.V. Moshchenskii // Russian Journal of Inorganic Chemistry. – 2017. – V. 62. – P. 563–570.

2. Egorova E.M. Phase equilibria of three-component reciprocal system $\text{Na,K} \parallel \text{I,MoO}_4$ / E.M. Egorova, E.O. Ignat'eva, I.K. Garkushin, **I.M. Kondratyuk** // Russian Journal of Inorganic Chemistry. – 2018. – V.63. – P.675–681.

3. Burchakov A.V. Phase equilibria in the system $\text{LiF-KI-KF-K}_2\text{CrO}_4$ / A.V. Burchakov, E.M. Egorova, **I.M. Kondratyuk**, Y.V. Moshchenskii // Russian Journal of Inorganic Chemistry. – 2018. – V.63. – P. 950–961.

4. Egorova E.M. Investigation of phase equilibria in the ternary systems $\text{RbCl-RbI-Rb}_2\text{CrO}_4$ and $\text{CsCl-CsI-Cs}_2\text{CrO}_4$ / E.M. Egorova, I.K. Garkushin, **I.M. Kondratyuk**, O.A. Tarasova // Russian Journal of Inorganic Chemistry. – 2020. – V. 65. – P. 567–572.

5. Verdiev N.N. Phase equilibria in the $\text{NaF-NaCl-NaBr-Na}_2\text{CrO}_4$ system / N.N. Verdiev, Z.N. Verdиеva, A.B. Alkhasov, P.A. Musaeva, I.K. Garkushin, A.V. Burchakov, **I.M. Kondratyuk**, E.M. Egorova // Inorganic Materials. – 2020. – V. 56. – P. 1179–1187.

6. Verdiev N.N. Heat-storage mixture of sodium halogenides and chromates / N.N. Verdiev, I.K. Garkushin, Z.N. Verdиеva, A.V. Burchakov, **I.M. Kondratyuk**, E.M. Egorova // High Temperature. – 2021. – V. 59. – P. 73–76.

7. Burchakov A.V. Phase complex modeling for the $\text{Na}^+, \text{Sr}^{2+} \parallel \text{Cl}^-, \text{WO}_4^{2-}$ three-component reciprocal system / A.V. Burchakov, I.K. Garkushin, **I.M. Kondratyuk**, E.M. Egorova, S.N. Milov // Russian Journal of Inorganic Chemistry. – 2021. – V. 66. – P. 1021–1030.

Рыльцев Роман Евгеньевич, доктор физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния», заведующий лабораторией неупорядоченных систем ФГБУН Института металлургии УрО РАН. Область научных интересов – моделирование структуры, транспортных и термодинамических характеристик, а также фазовых равновесий в молекулярных, металлических и наночастичных системах. Список публикаций, наиболее близких к теме диссертационной работы:

1. Levashov V.A. Anomalous behavior and structure of a liquid of particles interacting through the harmonic-repulsive pair potential near the crystallization transition / V.A. Levashov, **R.E. Ryltsev**, N.M. Chtchelkatchev // Soft Matter. – 2019. – V. 15. – P. 8840–8854.

2. Kamaeva L.V. Viscosity, undercoolability and short-range order in quasicrystal-forming Al-Cu-Fe melts / L.V. Kamaeva, **R.E. Ryltsev**, V.I. Lad'yanov, N.M. Chtchelkatchev // Journal of Molecular Liquids. – 2020. – V. 299. – P. 112207-1–112207-13.

3. Dubinin N.E. Effective pair interactions and structure in liquid noble metals within Wills-Harrison and Bretonnet-Silbert models / N.E. Dubinin, **R.E. Ryltsev** // Metals. – 2021. – V. 11. – P. 1115-1–1115-15.

4. **Ryltsev R.E.** Laves phase formation in high entropy alloys / **R.E. Ryltsev**, V.S. Gaviko, S.K. Estemirova, E.V. Sterkhov, L.A. Cherepanova, D.A. Yagodin, N.M. Chtchelkatchev, N.E. Dubinin, S.A. Uporov // *Metals*. – 2021. – V. 11. – P. 1962-1–1962-17.

5. **Ryltsev R.E.** Pressure effects on electronic structure and electrical conductivity of TiZrHfNb high-entropy alloy / S.A. Uporov, **R.E. Ryltsev**, V.A. Sidorov, S.K. Estemirova, E.V. Sterkhov, N.M. Chtchelkatchev // *Intermetallics*. – 2022. – V. 140. – P. 107394-1–107394-9.

6. **Ryltsev R.E.** Structural evolution in TiZrHfNb high-entropy alloy / **R.E. Ryltsev**, S.K. Estemirova, V.S. Gaviko, D.A. Yagodin, V.A. Bykov, E.V. Sterkhov, L.A. Cherepanova, I.S. Sipatov, I.A. Balyakin, S.A. Uporov // *Materialia*. – 2022. – V. 21. – P. 101311-1–101311-9.

7. **Ryltsev R.E.** Deep machine learning potentials for multicomponent metallic melts: Development, predictability and compositional transferability / **R.E. Ryltsev**, N.M. Chtchelkatchev // *Journal of Molecular Liquids*. – 2022. – V. 349. – P. 118181-1–118181-10.

Согласие предполагаемых оппонентов получено.

ПОСТАНОВИЛИ:

– Принять диссертацию Давыдова А.Г. к защите.

– Назначить официальными оппонентами:

1. **Кондратюка Игоря Мирославовича**, доктора химических наук, профессора кафедры общей и неорганической химии Самарского государственного технического университета.

2. **Рыльцева Романа Евгеньевича**, доктора физико-математических наук заведующего лабораторией неупорядоченных систем ФГБУН Института металлургии УрО РАН

– Назначить ведущей организацией по защите

ФГБУН Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, г. Иваново.

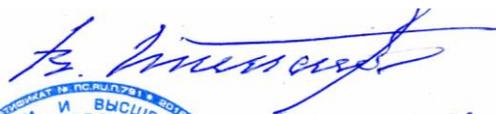
– Утвердить дату защиты диссертации **30 ноября 2022 г., 13.00**

– Разрешить публикацию автореферата диссертации в количестве 100 экземпляров.

– Утвердить список адресов для рассылки автореферата.

Заместитель председателя
диссертационного совета д.х.н.

Ученый секретарь
диссертационного совета к.х.н.



В.П. Степанов



Н.П. Кулик

Подписи Степанова В.П. и Кулик Н.П. заверяю

Ученый секретарь ИВТЭ УрО РАН к.х.н.



А.О. Коди́нцева

22.09.2022