

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.

В настоящее время все большую роль как в фундаментальной, так и в прикладной науке (в том числе в атомной науке) играют расчеты, основанные на математическом моделировании, квантово-механических и термодинамических методах. Бурный прогресс в компьютерной технике и программном обеспечении позволяет добиваться высокой точности расчета даже для сложных систем. При этом удается значительно сократить объем трудоемких экспериментов, необходимых для получения конечного результата.

Расплавы галогенидов щелочных металлов широко используются или рассматриваются к использованию в самых разнообразных областях. В частности, расплавы на основе фторидов щелочных металлов перспективны в ядерной энергетике как среда для жидкосолевых реакторов. Они также представляют интерес для развития ториевого топливного цикла, что позволило бы значительно расширить сырьевую базу атомной энергетики и избежать накопления трансплутониевых элементов, представляющих большую опасность для окружающей среды. В этой связи представленная А.Г. Давыдовым диссертация является актуальной, а ее результаты – практически значимыми.

Научная новизна работы связана прежде всего с разработанной автором моделью учета поляризационных поправок к термодинамическим свойствам расплавленных солей, в которой учитываются также различающиеся радиусы катиона и аниона. Автор рассматривает следствия изменения кулоновского и поляризационного вклада в исследуемое свойство и показывает, что предлагаемая интерпретация не выходит за рамки допустимого коридора погрешности.

Детально проанализирована зависимость свойств расплавов как от суммы, так и от разности радиусов катионов и анионов. Показано, что природа аниона влияет на рассматриваемые свойства в значительно большей степени, чем природа катиона.

При общей высокой оценке работы по ней можно сделать некоторые замечания.

1. Во введении к автореферату встречается непонятная фраза (очевидно, пропущены какие-то слова): «Отметим здесь и на плотность, которая является важнейшим параметром состояния».
2. Свободная энергия в термодинамике обычно рассчитывается относительно некоторого состояния, выбранного в качестве стандартного. Что является стандартным состоянием для приводимых в

работе данных? Совокупность невзаимодействующих (газообразных) ионов? Желательно пояснить.

3. При обсуждении табл. 2 автор отмечает, что расхождение между расчетными и экспериментальными данными не превышает 10%. Однако видно, что данная разница носит систематический характер: расчетные значения занижены по абсолютной величине по отношению к экспериментальным примерно на 40–50 кДж/моль. На мой взгляд, это следовало бы отметить и обсудить возможность введения фиксированной поправки к расчетным данным, что позволило бы повысить предсказательную точность.
4. Есть замечания по оформлению рисунков. Для лучшего восприятия материала на рис. 1 и 4 следовало бы проставить символы щелочных металлов в соответствующих местах, а на рис. 2 сделать значки разной конфигурации для разных галогенов с пояснением в «легенде».

Высказанные замечания относятся скорее к оформлению работы, не затрагивают ее основных результатов и выводов и не влияют на ее научную и практическую значимость. Материалы диссертации опубликованы в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК, прошли апробацию на российских и международных конференциях. Работа поддерживалась Российским фондом фундаментальных исследований.

По своей актуальности, научной и практической значимости результатов и выводов представленная работа отвечает требованиям п.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Правительством Российской Федерации 24 сентября 2013 г. № 842 с дополнениями 26 сентября 2022 г. № 1690, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Давыдов Александр Георгиевич, заслуживает присвоения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Сидоренко Георгий Васильевич, доктор химических наук по специальности 02.00.14 – Радиохимия, ведущий научный сотрудник АО «Радиевый институт им. В.Г. Хлопина».

Адрес организации:

194021, г. Санкт-Петербург, 2-й Муринский пр., д. 28

E-mail: gevasid@mail.ru

Тел. +7-921-925-86-97

15.11.2022

дата



подпись

/ Сидоренко Георгий Васильевич

Подпись Сидоренко Георгия Васильевича заверяю:

Главный специалист



Михайлова И.В.