

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

Расплавы галогенидов щелочных металлов (ГЩМ) – широко используемый в различных промышленных отраслях класс солей. К настоящему времени область применения расплавов ГЩМ значительно расширилась благодаря их использованию в атомной промышленности и энергетике при создании жидко-солевых ядерных реакторов и химических источников тока, а также, например, при аккумулировании солнечной энергии. Для дальнейшей разработки и совершенствования технологических особенностей протекания соответствующих физико-химических процессов с участием ГЩМ крайне необходима информация о термодинамических свойствах указанных жидких солей. В диссертационной работе А.Г. Давыдова впервые проведено детальное систематическое теоретическое исследование различных термодинамических характеристик расплавленных галогенидов щелочных металлов. Автором диссертационного исследования впервые рассмотрен полный набор физико-химических свойств таких, как плотность, свободная энергия образования Гиббса, энтальпия и теплоемкость широкого спектра ГЩМ. Проведена большая работа по изучению и анализу существующих экспериментальных данных. Для комплексного количественного описания и интерпретации указанных выше свойств А.Г. Давыдовым в соавторстве с д.х.н. Н.К.Ткачевым впервые разработана модель учета поляризационных взаимодействий между ионами ГЩМ. Изучено влияние поляризационных взаимодействий на каждое из рассмотренных свойств, а также при описании фазовых равновесий между расплавом и кристаллом. Необходимо подчеркнуть, что предложенная в рассматриваемой работе интерпретация изменения физико-химических свойств от суммы ионных радиусов и поляризуемостей, а также от различия в радиусах катионов и анионов позволяет наиболее ярко выявить и объяснить зависимость свойств ГЩМ от особенностей химического состава. Предложенная физико-химическая модель, результаты анализа и сформулированные в диссертационном исследовании выводы сделаны впервые и не вызывают сомнений. Успешно проведенная систематизация термодинамических свойств щелочно-галогидных расплавов наглядно иллюстрирует исключительную значимость результатов, полученных А.Г.

Давыдовым для решения фундаментальных и актуальных задач современной физической химии.

Целесообразно особенно выделить наиболее яркие, полезные и новые результаты, полученные А.Г. Давыдовым:

- разработан вариант термодинамической теории возмущений, позволяющий учитывать заряд-дипольные взаимодействия в расплавленных солях;

- проведен комплексный анализ теплостей класса ГЦМ, что позволило выделить рекомендуемые и наиболее достоверные значения из большого многообразия экспериментальных данных;

- получено уравнение состояния, способное количественно описать плотность щелочно-галогидных расплавов при различных давлениях и температурах.

К сожалению, из текста автореферата не вполне ясно следующее.

1. Существует ли в настоящее время проблема достоверного определения ионных радиусов вблизи температуры плавления при ее теоретическом расчете, так как общепринятые в настоящее время наборы ионных радиусов, например, по Полингу или Гольдшмидту были составлены для комнатных температур и требуют, по-видимому, корректировки при высоких температурах.
2. Чем обусловлена высокая точность экспериментальных значений энергий Гиббса расплавов ГЦМ в точках плавления, приведенных в таблице 2? Каким экспериментальным методом были получены приведенные экспериментальные значения и с какой погрешностью?
3. Почему А.Г. Давыдов использует в тексте работы термин «свободная» энергия Гиббса? Согласно рекомендациям Международного союза по чистой и прикладной химии (IUPAC), начиная с начала девяностых годов, был принят термин «энергия Гиббса...».

Необходимо отметить, что приведенные выше незначительные комментарии не снижают исключительно высокой положительной оценки рассмотренного диссертационного исследования.

Диссертационная работа, тщательно выполненная А.Г. Давыдовым, представляет собой важное и значимое физико-химическое исследование, в результате выполнения которого получены достоверные результаты и сделаны корректные и значимые выводы, о чем также свидетельствуют публикации в рейтинговых научных журналах.

Таким образом, проведенное исследование по своей актуальности, научной новизне, объему и качеству материала, а также практической значимости полученных результатов полностью соответствует критериям,

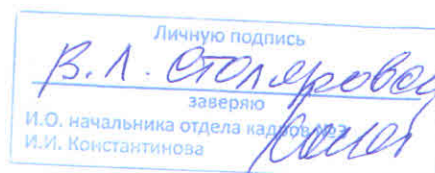
определенным в пп. 2.9-2.14 «Положения о присуждении ученых степеней» от 24 сентября 2013 г. № 842 (с поправками от 26 сентября 2022 г. № 1690), а автор работы, А.Г. Давыдов, бесспорно достоин присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Доктор химических наук, академик РАН, профессор,
профессор кафедры общей и неорганической химии
Санкт-Петербургского государственного университета
Столярова Валентина Леонидовна

Адрес места работы: 199034, г. Санкт-Петербург, Университетская наб. 7/9
Электронная почта: v.stolyarova@spbu.ru
Рабочий телефон: 8(812)428-40-67

16.11.2022
дата

 / Столярова В.Л./
подпись



16.11.2022



Текст документа размещен
в открытом доступе
на сайте СПбГУ по адресу
<http://spbu.ru/science/expert.html>