

## 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 теоретическому описанию термодинамических характеристик расплавленных галогенидов щелочных металлов. Указанные системы широко используются в практике, в достаточной степени изучены экспериментально и поэтому являются хорошими модельными объектами для проверки соответствия теоретических подходов. Однако анализ показывает, что теории, адекватно учитывающие все особенности подобных систем, развиты недостаточно. Это обстоятельство и определяет актуальность диссертационной работы, посвященной разработке термодинамической теории возмущений, учитывающей специфику солевых систем, для расчетов равновесных термодинамических свойств расплавленных галогенидов щелочных металлов. Выбор термодинамической теории возмущений и базиса в виде модели заряженных твердых сфер различающихся диаметров представляется достаточно новым и вполне логичным. Диссертационная работа А.Г. Давыдова выгодно отличается единообразием подхода ко всем рассмотренным термодинамическим свойствам - свободной энергии Гиббса, энтальпии, теплоемкости, плотности, а также расчетам элементов фазовых диаграмм.

В качестве замечания к автореферату отмечу, что используемое автором выражение для индукционного вклада в свободную энергию (формула 2 в автореферате) содержит парциальные структурные факторы системы сравнения заряженных твердых сфер. Из текста автореферата непонятно, проводилось ли сравнение данных функций с известными экспериментальными или расчётными данными по структуре исследуемых систем. Такое сравнение было бы полезным для анализа адекватности выбора системы сравнения.

Сделанное замечание не умаляет общего положительного впечатления от работы. Работы автора известны, они неоднократно докладывались и обсуждались на профильных российских и международных конференциях, опубликованы в рецензируемых журналах хорошего уровня. Проведенное исследование по научной новизне и актуальности, публикациям в рейтинговых журналах, положенным в ее основу, 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.

*Я, Шуняев Константин Юрьевич, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой диссертации Давыдова Александра Георгиевича, и их дальнейшую обработку.*

Шуняев Константин Юрьевич

Доктор химических наук, профессор

Институт металлургии УрО РАН, главный научный сотрудник

620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 101

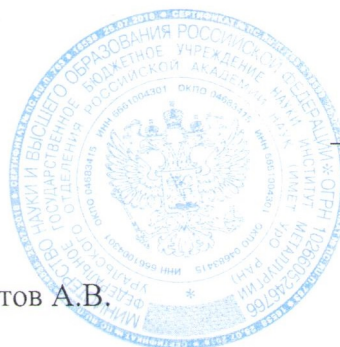
Тел.: +7(343) 267-89-36, +7(343) 232-90-88

E-mail: [k\\_shun@mail.ru](mailto:k_shun@mail.ru)

16.11.2022 г.

Подпись К.Ю. Шуняева заверяю

Ученый секретарь ИМЕТ УрО РАН, к.х.н. Долматов А.В.



*[Handwritten signature]*

*[Handwritten signature]*