

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Малютин Алексей Сергеевич
«Термодинамические модели фаз в водно-солевых системах на
основе сульфатов и нитратов уранила и тория»,
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук
по специальности 1.4.4. Физическая химия (химические науки)

Целью диссертационной работы Малютин А.С. является построение термодинамических моделей, которые позволяли бы корректно прогнозировать термодинамические свойства фаз и фазовые равновесия в системах, образованных нитратами и сульфатами уранила и тория. В дальнейшем эти модели будут применяться при выборе оптимальных условия выделения соединений U(VI) и Th(IV) из природного сырья и техногенных отходов.

При выполнении работы Малютин Алексей Сергеевич использовал как экспериментальные, так и расчетные методы современной химической термодинамики, что характеризует его как квалифицированного термодинамика широкого профиля. В результате проведенных исследований, он впервые экспериментально определил активность воды в сернокислых растворах сульфата уранила различного состава при трех температурах в интервале 298.15 - 323.15 К.

Им предложена политермическая модель жидкой фазы ключевой подсистемы вода – азотная кислота в рамках формализма Питцера, в явном виде учитывающая неполноту диссоциации азотной кислоты, и построены взаимосогласованные политермические модели твердых и жидких фаз четырех трехкомпонентных систем, образованных H_2O , HNO_3 , H_2SO_4 , $\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2$, $\text{Th}(\text{NO}_3)_4$, UO_2SO_4 и $\text{Th}(\text{SO}_4)_2$. На конкретных примерах показано, что качество описания этих систем позволяет делать вывод о том, что предложенные модели обладают приемлемой предсказательной способностью и могут быть использованы при решении реальных технологических задач.

Полученные результаты имеют как теоретическую, так и практическую значимость. Методология и программное обеспечение на базе уравнений Питцера и Питцера-Симонсона-Клегга, разработанные в ходе данной работы, могут быть использованы при моделировании многокомпонентных систем, содержащих, помимо прочих веществ, нитраты и сульфаты уранила и тория. О важности данного направления исследований свидетельствует и грантовая поддержка со стороны РФФИ.

Результаты работы прошли успешную апробацию, они опубликованы в 4-х рецензируемых научных журналах, входящих в перечень ВАК и индексируемых Scopus и Web of Science, доложены на 4-х российских и международных конференциях, что подтверждает их актуальность, научную и практическую значимость.

При прочтении автореферата возник вопрос по выводу о растворимости дигидрата нитрата уранила: «Допущение о полной диссоциации электролитов в рамках формализма Питцера-Симонсона-Клегга является одной из возможных причин расхождения расчётных и экспериментальных значений растворимости кристаллогидрата $\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ». Из текста автореферата не вполне понятно, идет ли речь о концентрациях, аналогичных концентрациям азотной кислоты, для которой учет неполной дис-

социации позволил улучшить описание, или все-таки не стоит отказываться от предположения, что причина расхождения может быть в проблемах, связанных с экспериментом (литературные данные)?

Указанное замечание не влияет на общую положительную оценку работы. Анализ автореферата позволяет заключить, что диссертация соответствует паспорту специальности 1.4.4. Физическая химия по химическим наукам. Проведенные исследования (по своей актуальности, научной новизне, объему и практической значимости полученных результатов) соответствуют критериям, определенным пп. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова», а автор работы – Малютин Алексей Сергеевич – заслуживает присуждения ученой степени кандидата наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Мацкевич Ната Ивановна,

доктор химических наук (специальность – 02.00.04 – физическая химия),

доцент, ведущий научный сотрудник лаборатории термодинамики неорганических материалов

ФГБУН Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН

630090, Новосибирск, пр-т Академика Лаврентьева, 3

Тел. [REDACTED] e-mail: nata@niic.nsc.ru

[REDACTED]
20.10.2023