

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Закирьянова Дмитрия Олеговича «Неэмпирические расчеты температур плавления, коэффициентов теплопроводности и локальной структуры галогенидных и оксигалогенидных расплавов», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия

Расплавы солей находят широкое применение в промышленности – в качестве теплоносителей, рабочих сред при получении большинства редкоземельных металлов, химико-термической обработке металлов, в качестве реакционных сред, при переработке минерального сырья, при выращивании монокристаллов оптических материалов и сегнетоэлектриков, проведении неорганического и органического. Для обеспечения оптимальных условий и режимов проведения технологических процессов необходимо знание как физико-химических свойств расплавов, так и их строения. Все это и определяет актуальность научных исследований, направленных на получение экспериментальных данных по свойствам расплавленных солей и поиску закономерностей их изменения в зависимости от размера катиона и аниона соли. При этом наряду с физическими методами исследования решение поставленных задач возможно с применением методов компьютерного (численного) эксперимента.

В представленной работе для галогенидов щелочных металлов проведен анализ температур плавления и коэффициентов теплопроводности. Рассчитаны параметры парных потенциалов ион-ионных взаимодействий, для галогенидов и оксигалогенидов свинца и гадолиния изучена микроструктура их расплавов.

На основе полученных данных сделан вывод о том, что температура плавления галогенидов щелочных металлов снижается по мере увеличения разницы в размерах катиона и аниона. Найдено, что вблизи температуры плавления безразмерная величина, включающая в себя коэффициент теплопроводности, температуру плавления и период колебаний катиона и аниона, одинакова для всех галогенидов щелочных металлов. Сделаны выводы об отсутствии устойчивых связанных группировок в галогенидах свинца, в то время как в оксигалогенидах свинца существуют свинцово-кислородные ассоциаты, окруженные галогенид-ионами. В расплавах солей гадолиния кислородный ассоциат гадолиния встроен в структуру исходного хлоридного расплава.

К сожалению, в тексте реферата не указано, какие программные продукты использовались при выполнении расчетов.

В целом диссертация Закирьянова Д.О. по своей актуальности, научной новизне и практической значимости, достоверности результатов и сделанных выводов отвечает требованиям пп. 9-11, 13, 14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842, предъявляемым к квалификационным работам на соискание ученой степени кандидата химических наук, а ее автор, Закирьянов Дмитрий Олегович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 - физическая химия.

Главный научный сотрудник
Института химии растворов им. Г.А.Крестова
Российской академии наук,

доктор химических наук по специальности
02.00.04 - физическая химия, профессор
Лаборатория "Структура и динамика молекулярных и ион-молекулярных растворов"

Сафонова Любовь Петровна

Сафонова Л.П.

153045 г. Иваново, ул. Академическая, д. 1. Тел. (8932)351679, E-mail: lps@isc-ras.ru

08.02.2021

