

## ОТЗЫВ

об автореферате диссертации 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.

Теоретическое описание поведения расплавов солей, сочетающее квантовомеханические первопринципы с молекулярно-динамическим моделированием, является весьма привлекательным подходом, при котором не требуется опираться ни на упрощенные модели структуры расплава, ни на эмпирические корреляции для макроскопических свойств. Такой теоретический подход детально разработан в диссертации Закирьянова Д.О. при исследовании структуры и физико-химических свойств расплавов. Последовательное усложнение выбираемых автором объектов исследования, – вначале галогенидов щелочных металлов, а затем галогенидных и оксигалогенидных расплавов, содержащих двух- и трехвалентные катионы кальция, свинца и гадолиния, – представляется обоснованным, поскольку первые являются наиболее изученным классом расплавов, в то время как для вторых все еще отсутствуют надежные методы прогнозирования локальной структуры.

**Актуальность** решаемой автором задачи, **научная новизна** работы, а также **обоснованность и достоверность** сделанных автором **выводов** сомнений не вызывает. **Практическая значимость** работы определяется тем, что полученные фундаментальные результаты (в частности, новые параметры потенциала Борна-Майера, развитые автором методики расчета температур ликвидуса, данные о структуре оксидных расплавов свинца и гадолиния) весьма востребованы при разработке целого ряда технологических процессов. Автореферат написан логично и сжато, и оставляет хорошее впечатление. Результаты работы опубликованы достаточно полно, при этом ряд статей – в журналах WOS/Scopus с высоким рейтингом.

По автореферату диссертации имеются следующие **вопросы и замечания**:

1. Хотя приведенная на рис 1 кривая в целом верно передает наблюдаемую тенденцию, можно заметить, что экспериментальные точки на этом рисунке в большей степени соответствуют не параболе, а семейству прямых, в котором каждая прямая отвечает набору солей с

общим катионом. Кроме того, температура плавления LiF существенно выпадает из представленной в автореферате корреляционной зависимости. Указанные обстоятельства никак не обсуждаются в автореферате. Было бы также целесообразно показать результаты расчета автора (из табл. 3) на этом же рисунке.

2. Присутствуют технические огрехи в оформлении автореферата. Так, не определен символ  $\Delta E$  на рис. 2; не расшифрованы обозначения кривых 1, 2 и 3 на рис. 3а, 3б; текст содержит отдельные опечатки («...типа, которые использованные Фуми...» и др.).

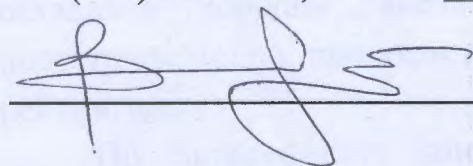
Указанные замечания не снижают высокой оценки рассматриваемой работы. Судя по автореферату, диссертационная работа Закирьянова О.Д. соответствует паспорту специальности 02.00.04 – физическая химия и отвечает критериям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук (в соответствии с пунктами 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842, с изменениями Постановлений Правительства РФ от 21.04.2016 г. № 335; 02.08.2016 № 748; 29.05.2017 № 650), а автор работы, **Закирьянов Дмитрий Олегович**, заслуживает присуждения искомой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

доктор химических наук, профессор,  
профессор кафедры физической химии  
ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет»,  
199004, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., 7/9

Веб-сайт: <http://spbu.ru>

Телефон: +7(812) 328-20-00

+7 (921) 301 1178; e-mail: [a.viktorov@spbu.ru](mailto:a.viktorov@spbu.ru)



/ Викторов Алексей Исмаилович

26.01.2021.

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



ДОКУМЕНТ  
ПОДГОТОВЛЕН  
ПО ЛИЧНОЙ  
ИНИЦИАТИВЕ