

## ОТЗЫВ

на автореферат 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

Диссертация Закирьянова Д.О. посвящена актуальной проблеме – исследованию физико-химических свойств и структуры галогенидных и оксигалогенидных расплавов неэмпирическими методами. Изучение свойств расплавленных электролитов имеет большое значение для развития физической химии солевых систем и тесно связано с рядом практических задач для многих технологических приложений в атомной промышленности, электрометаллургии и др. Применение неэмпирических расчетов, теоретических методов исследования позволяет не только объяснять экспериментальные результаты, но и прогнозировать физико-химические свойства расплавленных солей, рассчитать эти свойства без использования экспериментальных данных.

К наиболее значимым результатам диссертационной работы относится хорошее согласие рассчитанных в диссертации температур плавления и коэффициентов теплопроводности галогенидов щелочных металлов с литературными данными. Представленные в диссертации результаты моделирования колебательных спектров хлоридов кальция и свинца хорошо соотносятся с экспериментальными данными для расплавов этих солей.

При прочтении автореферата возникли следующие вопросы и замечания:

1. В автореферате не указано, какая программа использовалась для квантово-химических расчетов исследуемых объектов.

2. На рис. 1 (автореферат) не приводятся результаты для RbBr и CsBr. С чем это связано?



Высказанные замечания никак не влияют на высокую оценку работы, которая представляет собой завершенное научное исследование.

Диссертационная работа «Неэмпирические расчеты температур плавления, коэффициентов теплопроводности и локальной структуры галогенидных и оксигалогенидных расплавов» полностью удовлетворяет требованиям п.9 «Положения о присуждении ученых степеней», предъявляемым ВАК, а ее автор, Закирьянов Дмитрий Олегович, несомненно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия».

доктор физико-математических наук,  
заведующий Аналитическим центром коллективного пользования  
Дагестанского федерального исследовательского центра РАН



Гафуров Малик Магомедович

25.01.2021 г.

367032, г. Махачкала, ул. М. Гаджиева, 45.

Телефон: +7-928-589-85-45

E-mail: malik52@mail.ru

Подпись Гафурова М.М. заверяю

Главный ученый секретарь ДФИЦ РАН,

доктор физико-математических наук



Зобов Е.М.