

**Отзыв на автореферат диссертации Закирьянова Дмитрия Олеговича «»  
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по  
специальности 02.00.04 – Физическая химия**

В диссертационной работе Закирьянова Дмитрия Олеговича «Неэмпирические расчеты температур плавления, коэффициентов теплопроводности и локальной структуры галогенидных и оксигалогенидных расплавов» представлены результаты теоретических исследований в области квантово-химических расчетов и молекулярно-динамического моделирования изменений температур плавления и коэффициентов теплопроводности галогенидов щелочных металлов, а также изучение локальной структуры галогенидных и оксигалогенидных расплавленных систем с двух- и трехвалентными катионами кальция, свинца и гадолиния.

Практическая значимость диссертационной работы Закирьянова Дмитрия Олеговича заключена в применении современных вычислительных методов квантовой химии и молекулярно-динамического моделирования для исследований расплавов солей металлов. Стоит отметить следующие важные для физикохимии расплавов солей металлов результаты диссертационной работы Закирьянова Дмитрия Олеговича. Впервые получены данные о плотности, локальной структуре и коэффициентах самодиффузии ионов расплавленных оксигалогенидов свинца, что важно для понимания процессов электрофинирования свинцовых сплавов. Для модельных расплавов системы  $GdCl_3 + Gd_2O_3 + KCl$  сделан вывод о возможном существовании в таком оксидно-хлоридном расплаве ассоциатов, в которых атом кислорода окружен тремя атомами гадолиния.

По диссертационной работе Закирьянова Дмитрия Олеговича имеются следующие замечания.

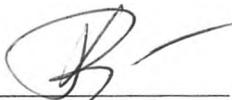
- 1) При расчете энергии парных взаимодействий  $MX$  для расчета им был использован неэмпирический метод теории возмущений Меллера-Плессе второго порядка (MP2) с валентно-расщепленными базисными наборами def2-TZVP в программе ORCA. Однако не указано проводились ли такие расчеты в полном приближении MP2(full) или в остоной аппроксимации.
- 2) При анализе данных по рассчитанным температурам плавления галогенидов щелочных металлов в сравнении с экспериментальными данными не указано, чем объясняется сильное расхождение между расчетом и экспериментом для солей LiBr и LiI, для которых расхождения в предсказанных температурах плавления по сравнению с экспериментом завышены на 73 К и 144 К соответственно.
- 3) При *ab initio* моделировании наноразмерных кластеров хлоридов кальция и свинца была использована теория функционала электронной плотности с функционалом PBE, однако не поясняется, почему из огромного разнообразия современных функционалов плотности для решения поставленной задачи был выбран именно функционал PBE.
- 4) Рассчитанные коэффициенты самодиффузии в расплаве  $GdCl_3$  не сопоставлены с данными ранних работ.

Возможно, в тексте диссертации эти вопросы рассмотрены более подробно. Высказанные замечания не снижают достоинств работы, которая выполнена на высоком научном уровне.

Диссертационная работа «Неэмпирические расчеты температур плавления, коэффициентов теплопроводности и локальной структуры галогенидных и оксигалогенидных расплавов» соответствует критериям, установленным п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор – Закирьянов Дмитрий

Олегович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия».

Доктор химических наук, профессор,  
заведующий кафедрой неорганической  
и физической химии  
федерального государственного бюджетного  
образовательного учреждения  
высшего образования «Кабардино-Балкарский  
государственный университет им. Х.М. Бербекова



Кушков Хасби Билялович

04.02.2021

360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173.

Тел. 89287196727

hasbikushchov@yahoo.com

Подпись Кушова Х.Б. заверяю  
Ученый секретарь ФГБОУ ВО КБГУ



И.В.Ашинова