

ОТЗЫВ

научного руководителя

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

Закирьянов Дмитрий Олегович в 2016 году окончил с отличием магистратуру ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по направлению «Физика». Выпускная квалификационная работа Закирьянова Д.О. была посвящена квантово-химическому моделированию структуры и колебательных спектров кристаллов оксигалогенидов свинца $Pb_3O_2X_2$ ($X = Cl, Br, I$).

В 2016-2020 годах Закирьянов Д.О. обучался в очной аспирантуре Института высокотемпературной электрохимии УрО РАН по специальности «Физическая химия». Перед Д.О.Закирьяновым была поставлена задача развития квантово-химических исследований в лаборатории расплавленных солей, поэтому за время обучения в аспирантуре им были освоены современные подходы и методики численных экспериментов, например, квантовая и классическая молекулярная динамика, квантово-химические расчеты парных потенциалов с помощью существующих пакетов программного обеспечения.

В процессе работы над диссертационным исследованием Закирьянов Д.О. проявил завидную любознательность и креативность, умение работать над ошибками и добиваться решения поставленных задач. Были предложены оригинальные подходы к расчету колебательных свойств расплавов и температур ликвидуса бинарных смесей галогенидов щелочных металлов, к теплопроводности и локальной структуре. Эти и другие результаты были опубликованы в виде серии статей в отечественных и зарубежных журналах, рекомендованных ВАК. В целом, содержание диссертации отражено в 8 статьях и 6 тезисах всероссийских и международных конференций.

Закирьянов Д.О. является участником двух проектов РФФИ, где методами квантовой химии и молекулярной динамики рассчитывал структурные и колебательные свойства расплавов, температуры ликвидус бинарных солевых смесей.

В целом я могу охарактеризовать Д.О.Закирьянова как очень способного и ответственного научного работника. В лаборатории расплавленных солей Закирьянов Д.О. проявил навыки необходимые для квалифицированного исследователя, способного к самостоятельной научной работе. Считаю, что Закирьянов Д.О. имеет необходимую квалификацию и заслуживает присуждения степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Научный руководитель,
главный научный сотрудник лаборатории расплавленных солей
Института высокотемпературной
электрохимии УрО РАН,
доктор химических наук,
N.Tkachev@ihte.uran.ru
Почтовый адрес: 620137 Екатеринбург,
ул. Академическая, 20
тел.: 8(343)362-31-35

Ткачев Николай Константинович

09.12.2020

Подпись Н.К. Ткачева заверяю
зам. директора Института
высокотемпературной электрохимии УрО РАН,
кандидат химических наук,



А.Е. Дедюхин

09.12.2020